

Subbarrierenfusion als Tunneln von mehrdimensionalen Wellenpaketen

Disbui. München

1987

Jürgen Schneider





Digitized by the Internet Archive
in 2026

**Subbarrierenfusion als Tunneln
von mehrdimensionalen
Wellenpaketen**

**Dissertation der Fakultät für Physik
der
Ludwigs – Maximilians – Universität
München**

**vorgelegt von
Jürgen Schneider
aus München**

München, den 25. Mai 1987

. Gutachter Prof. Dr. H. H. Wolter

. Gutachter Prof. Dr. S. Skorka

ag der mündlichen Prüfung : 22. Juli 87

Zusammenfassung

Bei der Untersuchung von Fusionsreaktionen schwerer Ionen wurde gefunden, daß der gemessenen Wirkungsquerschnitt gegenüber den theoretischen Voraussagen auf der Basis eines nur vom relativen Abstand abhängigen Potentials erheblich erhöht ist. Diese Erhöhung wird mit der Anregung von zusätzlichen Freiheitsgraden der Kerne während der Reaktion begründet. Es handelt sich damit bei der Fusion um ein mehrdimensionales Tunnelproblem. Dazu wurden in letzter Zeit eine Reihe von Näherungen entwickelt, die jeweils nur einzelne Aspekte des Problems berücksichtigen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Fusion zeitabhängig als Tunneln von Wellenpaketen durch die von den betrachteten Freiheitsgraden aufgespannte Potentialbarriere beschrieben. Dies ist eine quantenmechanisch exakte Behandlung des Problems mit dem zusätzlichen Vorzug hoher Anschaulichkeit.

Die Wechselwirkungsenergie der Kerne wird im Rahmen des kollektiven Modells durch ein Doppelfaltungspotential berechnet. Die Oberflächenformen der Kerne werden durch drei stetig zusammengesetzte Rotationsflächen zweiter Ordnung (Ellipsoide bzw. Hyperboloide) beschrieben. Diese Parametrisierung erlaubt einen kontinuierlichen Übergang vom System getrennter Kerne bis zum fusionierten Kern, sowie die gleichzeitige Beschreibung von Deformation und Halsbildung. Bei symmetrischen Systemen kann man den Halsfreiheitsgrad auch als eine kollektive Beschreibung von Transferbeiträgen bezüglich der isolierten Kerne auffassen.

Die Rechnungen zeigen, daß die Subbarrierenfusion empfindlich von der richtigen Behandlung sowohl der Dynamik in allen Freiheitsgraden als auch der Grundzustandsschwingungen abhängt.

Wir finden, daß beide Freiheitsgrade etwa den gleichen Beitrag zur Erhöhung des Wirkungsquerschnitts liefern. Die Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten.

Inhalt

- 0. Einleitung
- 1. Theorie der Subbarrieren Fusion
 - 1.1 Eindimensionale Modelle
 - 1.1.1 Berechnung des Wirkungsquerschnitts
 - 1.1.2 Potentiale
 - 1.2 Zweidimensionale Rechnungen
 - 1.2.1 Nullpunktsschwingungen
 - 1.2.2 Mehrdimensionales Tunneln
 - 1.2.3 Die Methode gekoppelter Kanäle
 - 1.3 Das Modell für direkte Reaktionen
- 2. Der Wellenpaketalgorithmus
 - 2.1 Wellenpaketwirkungsquerschnitte
 - 2.1.1 Eindimensional
 - 2.1.2 Dreidimensional
 - 2.1.3 Partialwellenentwicklung von Wellenpaketen
 - 2.2 Zeitentwicklung
 - 2.2.1 Eindimensional
 - 2.2.2 Zweidimensional
 - 2.3 Fehlerabschätzung
 - 2.3.1 Zeitentwicklung
 - 2.3.2 Ortsableitungen
 - 2.4 Randbedingungen
 - 2.4.1 Lokalisierte Wellenpakete
 - 2.4.2 Wellenzüge
 - 2.4.3 Absorbierende Randbedingungen
 - 2.4.4 Stationäre Lösungen
 - 2.5 Anfangswellenpakete
 - 2.6 Vergleich von Wellenpaket – und CC – Verfahren
- 3. Fusionswirkungsquerschnitte
 - 3.1 Das Krappe – Nix – Sierk Potential
 - 3.2 Eindimensionales Modell

- 3.3 Das schematische Hals – Modell
- 3.4 Das Deformations – Modell
- 3.5 Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen
- 3.6 Klassische Grenzwerte
- 4. Drehimpulsverteilungen
- 5. Zusammenfassender Ausblick

Anhang

- A Numerische Verfahren
- A.1 Der Numerov Algorithmus
- A.2 Lösungsmethoden für Schrödingergleichungen
- B Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen
- C Literatur

0. Einleitung

Die Verschmelzung und der Zerfall von Atomkernen gehören seit den Anfängen der Kernphysik zu ihren interessantesten Untersuchungsgebieten. Diese zueinander inversen Prozesse lassen sich nur im Rahmen der Quantentheorie verstehen. Sie erklären sich durch das Tunneln von Kernen durch die aus der anziehenden Kern- und der abstoßenden Coulombkraft zwischen ihnen aufgebauten Potentialbarriere. Die Erklärung des α -Zerfalls schwerer Kerne gehörte zu den großen Erfolgen der frühen Quantenmechanik. Gamov /1/ konnte den näherungsweise linearen Zusammenhang zwischen dem Logarithmus der Zerfallsbreite und der Energie des α -Teilchens ableiten. Dazu verwendete er ein einfaches eindimensionales Modell für die Barriere und berechnete die Transmission in der semiklassischen WKB Näherung. Eindimensional bedeutet, daß außer dem Schwerpunktsabstand der Teilchen keine weiteren inneren Freiheitsgrade berücksichtigt werden, die Kerne also nicht angeregt werden können.

Im Rahmen derselben Näherung konnten Hill und Wheeler /2/ einen analytischen Ausdruck für die Tunnelwahrscheinlichkeit ableiten. Sie approximierten die Barriere durch eine umgekehrte Parabel mit gleicher Höhe und Scheitelkrümmung und erzielten damit gute Übereinstimmung mit den bis dahin bekannten experimentellen Daten.

Neues Interesse erlebte die Untersuchung der Kernfusion, als zur Berechnung der Syntheseraten der verschiedenen Kernarten in den Sternen die Wirkungsquerschnitte für die vollständige Fusion von leichten Ionen wie Sauerstoff und Kohlenstoff bei Energien weit unterhalb der Barriere benötigt wurden. Detaillierte Messungen dieser Größen zeigten, daß die Daten im allgemeinen als Tunneln durch eine eindimensionale Barriere befriedigend beschrieben werden können /3,4/.

Die Verwendung einer eindimensionalen Barriere setzt voraus, daß die Kerne während der Fusion als ganzes erhalten bleiben und obendrein sogar ihren (meist sphärisch symmetrischen) Grundzustand beibehalten. Anregungen in Form von Deformationen oder Vibrationen der

Kernoberfläche bleiben unberücksichtigt. Es zeigte sich, daß dieses Modell auch die Fusionsdaten schwerer Kerne im Bereich an und oberhalb der Barriere beschreiben kann.

Neue experimentelle Techniken und die Verwendung verbesserter Tandembeschleuniger /5/ erlaubten in den letzten Jahren die Bestimmung von Fusionsanregungsfunktionen schwerer Systeme bis weit unter die Coulombbarriere. Überraschenderweise fand man, daß die Wirkungsquerschnitte erheblich über den Voraussagen des eindimensionalen Modells lagen /6 – 11/. Bei manchen Experimenten wurde eine Anhebung von bis zu drei Größenordnungen gemessen. Abb. 1 zeigt einen Vergleich der Meßwerte mit den eindimensionalen Rechnungen für die Reaktion $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni} \rightarrow ^{116}\text{Ba}$.

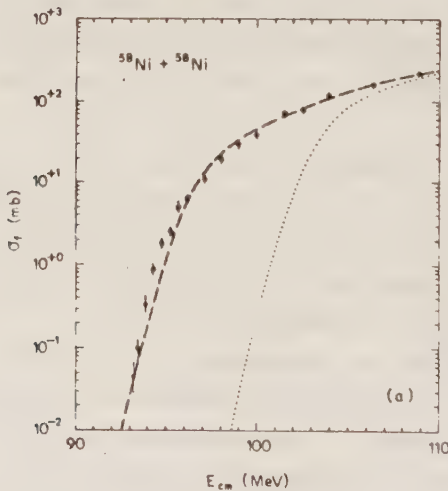


Abb. 1. Experimentelle Fusionsanregungsfunktion des Systems $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ im Vergleich zu der theoretischen Vorhersage des eindimensionalen Modells (Daten aus Ref. /7/).

Die Abweichungen wachsen in etwa mit dem Produkt der Ladungen der Reaktionspartner. Sie sind so groß, daß sie auch durch Anpassung von Parametern der Barriere nicht beseitigt werden können, sofern diese

noch physikalisch sinnvoll sein soll. Um die Daten mit dem eindimensionalen Modell reproduzieren zu können, müßte man eine vollkommen unrealistisch geformte Barriere verwenden. In Abb. 2 werden die Verhältnisse veranschaulicht. Die durchgezogene Linie stellt ein realistisches Kern - Kern Potential dar, dessen Parameter man durch Anpassung an experimentelle Daten wie Kernmassen, Anregungsenergien, Wirkungsquerschnitte bei Elektronenstreuung usw. erhält. Gestrichelt eingezeichnet ist die Parabel die bei der semiklassischen Näherung der Transmission Verwendung findet. Zur Beschreibung der Fusionwerte müßte man die sehr schmale, strichpunktierte Parabel in der Mitte verwenden. Es ist klar, daß sich keine realistische Barriere mit einer solchen Form finden läßt.

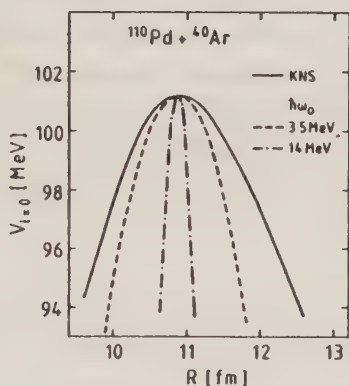


Abb. 2. Realistische Coulombbarriere und die dafür in semiklassischer Näherung verwendete Parabel mit gleicher Höhe und Scheitelkrümmung im Vergleich zu einer Parabel, mit der die Fusionswirkungsquerschnitte angepaßt werden könnten (aus Ref. /26/).

Der Vergleich von Meßwerten verschiedener Systeme zeigt eine weitere Unzulänglichkeit des eindimensionalen Modells auf. Die experimentellen Daten variieren sehr stark bei Veränderung der Kernstruktur. Die Existenz bestimmter tief liegender Anregungszustände, permanenter Deformationen oder zusätzlicher Valenznukleonen kann eine erhebliche

Erhöhung der Fusionswahrscheinlichkeit gegenüber anderen Kernen bewirken, bei denen diese Merkmale fehlen, die aber bezüglich globaler Eigenschaften, wie Masse und Ladung, die das Potential im eindimensionalen Modell fast vollständig festlegen, sehr ähnlich sind. Man kann schließen, daß komplexere Eigenschaften der Kerne von Bedeutung sind, die ein nur vom Abstand abhängiges Potential nicht enthalten kann. Es ist also notwendig, und im Nachhinein auch nicht sehr verwunderlich, daß bei der Fusion weitere Freiheitsgrade eine wichtige Rolle spielen. Experimentell liegen heute Ergebnisse an einer großen Zahl von Systemen vor, bei denen jeweils bestimmte Freiheitsgrade eine entscheidende Rolle zu spielen scheinen /8 – 11/.

Schwere Ionen besitzen eine große Zahl von Freiheitsgraden. Erlaubt man ihnen von ihrer Grundzustandsdichte abzuweichen, so wird ihre Dichteverteilung die Form annehmen, bei der die Wechselwirkungsenergie und damit letztlich auch die Barriere minimiert wird. Allerdings ist dabei zu beachten, daß die Anregung der verschiedenen Freiheitsgrade auch von den dynamischen Eigenschaften der Reaktion abhängt.

Anschaulich läßt sich die Verminderung der Barriere zum Teil aus der unterschiedlichen Stärke und Reichweite von Kern- und Coulombpotential verstehen. Länglich deformierte Kernen können sich leichter an den Spitzen nahe kommen. Trotz der kleinen wechselwirkenden Oberflächen wird die große Anziehung der Kernkräfte wirksam und führt zur Absenkung der Energie. Die Massen- und damit auch die Ladungsschwerpunkte haben dabei einen grösseren Abstand, als dies bei kugelförmigen Kernen der Fall wäre, wenn ihre Oberflächen den gleichen Abstand haben. Dadurch wird die Coulombabstoßung reduziert. Als Nettoeffekt ergibt sich eine Verminderung der Barriere.

Auch der Austausch von Nukleonen kann durch Änderung des Massen- und Ladungsverhältnisses der Reaktionspartner bewirken, daß sich eine niedrigere Barriere einstellt.

Zur theoretischen Behandlung von Fusionsreaktionen wurde eine Reihe von Modellen angewendet und neu entwickelt, die hier kurz charakteri-

siert und in Kapitel 2 im Detail besprochen werden.

Einige Autoren berechnen analytisch die Transmission durch die Barrieren von zweidimensionalen Modellpotentialen mit schematischen Kopplungen zwischen den Freiheitsgraden /14 – 16/. Die Ergebnisse deuten auf eine Erhöhung der Transmission gegenüber den eindimensionalen Rechnungen hin.

Im Modell der Grundzustandsschwingungen (zero point motion model) /14 – 17/ wird die diffuse Kernoberfläche als Ergebnis der Grundzustandsschwingungen der verschiedenen Moden des Kerns aufgefaßt. Man erhält eine kontinuierliche Verteilung der Barrierenhöhe in Abhängigkeit von diesen Deformationsschwingungen. Die Gesamttransmission ergibt sich durch Faltung der Transmission bei einer bestimmten Deformation mit deren Wahrscheinlichkeit, die durch die Wellenfunktion der Grundzustandsschwingung bestimmt ist.

Bei der Methode der gekoppelten Kanäle (coupled channel formalism) wird der Zustand des Systems mit Wechselwirkung nach den Eigenzuständen der freien Kerne entwickelt. Man erhält ein System von gekoppelten Schrödingergleichungen für die Beschreibung des Fusionsprozesses.

Vernachlässigt man die Ortsabhängigkeit der Kopplung, dann können diese Gleichungen in geschlossener Form entkoppelt werden (constant coupling model) /18 – 21/. Die Barriere spaltet in ein Ensemble von Barrieren auf, die gegen die undeformierte Barriere um die Eigenwerte der Kopplungsmatrix verschoben sind. Da es immer auch negative Eigenwerte geben muß /22/, wird die Transmission besonders bei niedrigen Energien angehoben, oberhalb der Barriere wird sie geringer.

Numerische Lösungen des nicht genäherten gekoppelten Gleichungssystems bestätigen qualitativ das Ergebnis der Näherung konstanter Kopplung, ergeben aber quantitativ niedrigere Wirkungsquerschnitte.

Bei der Beschreibung der elastischen Streuung in der Theorie der direkten Reaktionen (direct reaction theory) /23/ wird der Flußverlust

der einlaufenden Welle in andere Reaktionskanäle durch den Imaginärteil des optischen Potentials beschrieben. Ein Teil dieser Absorption ist auf Fusionsreaktionen zurückzuführen. Tamura et al. /24/ spalteten das absorbierende Potential empirisch in zwei Anteile auf, den Reaktions- und den Fusionsteil. Mit dem so definierten Fusionspotential errechneten sie aus der elastisch gestreuten Welle Fusionswahrscheinlichkeiten, mit denen man die Systematik der experimentellen Daten beschreiben kann.

Ein Hauptziel dieser theoretischen Untersuchungen der Subbarrierenfusion ist es, die Freiheitsgrade zu identifizieren, die die größten Beiträge zur Erhöhung des Wirkungsquerschnitts liefern. Die diskutierten Freiheitsgrade sind kollektive Deformationen der Kernoberflächen durch Vibrationen /16 – 18,25/ und Halsbildung /4,11,26 – 28/, Rotation bei statisch deformierten Kernen /10/ und Austausch von Nukleonen (Transfer) /29/.

Eine besondere Schwierigkeit bildet dabei die Strukturlosigkeit der Fusionsanregungsfunktionen. Diese sind im wesentlichen durch nur drei Parameter bestimmt : die Steigung im exponentiellen Energiebereich weit unterhalb der Barriere, die durch die Dicke der Barriere festgelegt ist, die Steigung oberhalb der Barriere und den Übergangspunkt zwischen den Bereichen. Die beiden letzten Größen sind durch Ort und Höhe der Barriere gegeben /30/. Man kann durch Anpassung von geeigneten dreiparametrigen Funktionen alle Fusionswirkungsquerschnitte wenigstens approximativ reproduzieren /26/. Andererseits führt die Ankopplung zusätzlicher Freiheitsgrade jeglicher Art zu qualitativ ähnlichen Änderungen der Ergebnisse. Wenn daher in einigen Modellen Parameter angepaßt werden (z.B. Kopplungsstärken), ist der Aussagegehalt nicht mehr sehr groß. Man kann aus ihnen insbesondere kaum schließen, wieviel die betrachteten Freiheitsgrade wirklich zur Fusion beitragen.

Eine zusätzliche Information liefern die in jüngster Zeit durchgeführten Messungen der Drehimpulsverteilungen der gebildeten Compoundkerne /31,32/. Dabei bestätigte sich die Erwartung, daß die Verteilungen

breiter und die Spinnerwartungswerte größer sind, als die Vorhersagen des eindimensionalen Modells. Die Messungen bestätigen somit die mehrdimensionalen Modelle, die auch eine Verbreiterung der Verteilungen liefern. Einzelne Messungen deuten auf Fusionsprodukte mit sehr hohem Spin bei niedrigen Energien /32/. Eine theoretische Erklärung dieser Ergebnisse steht noch aus.

Einen wesentlichen Einfluß auf die Fusion hat die Dynamik der inneren Freiheitsgrade im Wechselspiel zwischen Coulomb- und Kernkraft. Bei Abständen, bei denen die Kernkräfte noch vernachlässigbar sind, werden die Kerne Formen annehmen, die die langreichweitige Coulombabstoßung (bei vorgegebenem Schwerpunktsabstand) minimiert, zum Beispiel durch oblate Deformation. Die Trägheit der inneren Bewegung der Kerne kann ausreichen, daß diese Formen auf dem Weg zum Kontakt erhalten bleiben. Es wird dann bei geringen Abständen auch die Anziehung durch die Kernkräfte verringert, so daß sich dadurch eine Reduktion der Transmission ergeben kann. Ansätze, die die innere Dynamik der Kerne außer Acht lassen, können daher zu große Fusionsraten ergeben /33/.

Bei Fusionsreaktionen können Zustände die nur bei nahem Kontakt zweier Kerne angeregt werden, eine wichtige Rolle spielen. Solche Zustände unterscheiden sich sehr von den tiefliegenden Anregungen der einzelnen freien Kerne und lassen sich nur schlecht durch diese darstellen. Ein Beispiel ist die Ausbildung eines Halses zwischen den Kernen. In der Literatur wird dieser Einfluß zwar diskutiert, wegen der Schwierigkeit ihn zu beschreiben existieren bisher nur schematische Untersuchungen /26,28,34/.

In der vorliegenden Arbeit wurde die Fusionsreaktion $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ auf mehrdimensionalen Potentialflächen ohne freie (das heißt an Fusionsreaktionen angepaßte) Parameter untersucht. Als zusätzliche Freiheitsgrade verwenden wir Quadrupoldeformationen und die Ausbildung eines

Halses als Beispiel für niedrig liegende Zustände freier Kerne bzw. des Systems aus zwei Kernen. Die Transmission durch die Barriere wird mit der Methode der Zeitentwicklung von Wellenpaketen berechnet. Sie stellt eine quantenmechanisch exakte Formulierung des Problems dar und erlaubt die vollständige Behandlung der Dynamik der betrachteten Freiheitsgrade.

Im allgemeinen wird Streuung als stationärer Vorgang beschrieben. Der eigentlich physikalische Ablauf ist jedoch der, daß sich Projektil und Target bei einem Streuprozess als vieldimensionales Wellenpaket in der Zeit bewegen. Wegen der sehr geringen Energieunschärfe der Projektile (diese ist nicht gleich der Energieunschärfe des Strahls, die hauptsächlich durch die unterschiedliche Energie der verschiedenen Teilchen bestimmt ist), bzw. der großen Kohärenzlänge der Wellenpakete ist die stationäre Beschreibung praktisch exakt. Die Streuwelle ist die Lösung der stationären Schrödingergleichung mit der Randbedingung, daß sie weit weg vom Streuzentrum als Summe einer einlaufenden ebenen Welle und einer auslaufenden, gestreuten Kugelwelle dargestellt werden kann. Durch Interferenzen zwischen den Anteilen verliert man aber viel an Anschaulichkeit.

Die Wellenpaketmethode stellt den Streuprozess direkt als Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung dar. Ein Wellenpaket, das sich im Lauf der Zeit auf einer Potentialfläche bewegt, entspricht der aus der klassischen Mechanik übernommenen physikalischen Intuition von lokalisierten Teilchen und der Darstellung von physikalischen Vorgängen als zeitlicher Ablauf. In Ref. /36/ wurde der Übergang von Wellenpaketstreuung zur stationären Streuwelle an einem eindimensionalen Beispiel dargestellt.

Zeitabhängige Streuung wurde streng quantenmechanisch bisher sehr wenig untersucht. Die Literatur beschränkt sich im allgemeinen darauf, die stationäre Streutheorie als Grenzfall der Wellenpaketstreuung für vernachlässigbare Energieunschärfe abzuleiten /35/. Eine etwas detaillier-

tere Beschreibung findet sich bei Brenig und Haag /37/. Für die elastische Streuung von Gaußpaketen an Deltapotentialen hat Arnoldi /38/ eine analytische Lösung angegeben. In Ref. /36/ wurde das Verfahren auf ein Zweikanal Problem mit einem Kopplungs - Deltapotential angewendet.

Ein numerisches Verfahren zur Lösung der eindimensionalen zeitabhängigen Schrödingergleichung wurde von Goldberg, Schey und Schwarz /39/ und Hasse /40/ entwickelt. Hahn /41/ erweiterte es auf zweidimensionale Probleme und behandelte so dissipative Hamiltonoperatoren. Schneider /36/ wendete es auf Mehrkanalprobleme bei Energien oberhalb der Barriere an. Dabei wurde bereits auf die attraktiven Eigenschaften von Kopplungspotentialen hingewiesen, die man sogar bei geschlossenen - d.h. energetisch verbotenen - angeregten Kanälen finden kann. Dies ist besonders bei Fusionsreaktionen wichtig, da dadurch die Barriere erniedrigt wird.

Eine Beschreibung des Tunnelns durch mehrdimensionale Barrieren ist schwierig. Bei Verwendung der semiklassischen Näherung fehlt eine eindeutige Vorschrift, mit der die Bahn unter der Barriere bestimmt werden kann. Eine quantenmechanische Behandlung erlaubt die Methode der gekoppelten Kanäle. Hierbei zeigt sich allerdings, daß die Verwendung (relativ) weniger, physikalischer Kanäle nicht zu befriedigenden Ergebnissen führt. Eine Erhöhung der Kanalzahl bewirkt aber einen erheblichen Anstieg des numerischen Aufwands dieses Verfahrens.

Aus diesen Gründen wurde eine große Zahl von Näherungsmethoden entwickelt /12 - 19/. Die Wellenpaketmethode erlaubt eine quantenmechanisch exakte Behandlung dieses Problems. Es zeigte sich jedoch, daß die Anwendung des Verfahrens in seiner bisherigen Form auf Schwerionenreaktionen, bei denen relativ hohe Impulse bzw. kurze Wellenlängen auftreten, zu einem unverträglichem großem numerischen Aufwand geführt hätte. Es mußte daher bezüglich Impuls - und Zeitauflösung verbessert werden, um mit der verfügbaren Rechenkapazität quantitativ

brauchbare Ergebnisse zu erhalten. Trotzdem ist der numerische Aufwand an Rechenzeit und Speicherplatz beträchtlich.

Im Gegensatz zur sehr abstrakten Formulierung mit gekoppelten stationären Wellenfunktionen ist der Ablauf einer Reaktion mit der Zeitentwicklung eines Wellenpakets direkt zu verfolgen. Das Wellenpaket durchläuft während einer Kernreaktion einen Weg auf der Energiefläche, der es vom Grundzustand der Kerne bei großen Abständen bis an die Barriere führt. An der Barriere spaltet das Paket in einen Fusions- und einen mehr oder weniger stark angeregten reflektierten Reaktionsanteil auf. Anregungen des Systems relativ zu seinem Anfangszustand zeigen sich als Abweichungen vom geraden (eindimensionalen) Weg und als Änderung seiner Form.

Da Wellenpakete das quantenmechanische Analogon zu klassischen Teilchen sind, kann man über die Erwartungswerte von Operatoren die Beziehung zu den klassischen Größen herstellen, die zu diesen Operatoren korrespondieren. So ergibt die Berechnung von zeitabhängigen Orts-erwartungswerten das quantenmechanische Analogon zu klassischen Bahnkurven.

Es ist möglich die Ausbreitung von Wellen auf komplexen Potentialflächen zu untersuchen, ohne ein Entwicklung nach einem irgendwie gewähltem Basissystem durchführen zu müssen. Das ist besonders bei solchen Freiheitsgraden von Vorteil, die sich nicht einfach durch die Eigenfunktionen der freien Kerne darstellen lassen. Freiheitsgrade, die im wesentlichen nur zu einer ortsabhängigen Verschiebung des Potential-minimums, bei Fusionsreaktionen ist dies das Fusionstal, führen, können mit der Wellenpaketmethode fast ohne zusätzlichen Aufwand behandelt werden.

Die vorliegende Arbeit ist wie folgt gegliedert : In Kapitel 1 sind die bisher verwendeten Methoden zur Beschreibung der Subbarrieren Fusion zusammengestellt. In Kapitel 2 wird die Wellenpaketmethode und deren Zusammenhang mit der üblichen stationären Streutheorie erklärt. In

Kapitel 3 werden die untersuchten Modelle mit den dabei betrachteten Freiheitsgraden und den resultierenden Potentialflächen beschrieben. Wir stellen die Ergebnisse unserer Rechnungen vor und vergleichen sie mit anderen Rechnungen und dem Experiment. Die Drehimpulsverteilungen, die wir bei den verschiedenen Modellen erhalten, untersuchen wir in Kapitel 4 und vergleichen sie mit den Ergebnissen anderer Autoren. Unsere Schlußfolgerungen werden in Kapitel 5 diskutiert.

Da an unserem Rechenzentrum die Möglichkeit besteht direkt auf 16 – mm Film zu zeichnen, soll ein Film über Fusionsprozesse erstellt werden.

1. Theorie der Subbarrieren Fusion

Die Fusion kann aufgefaßt werden als Bewegung der Kerne auf einer multidimensionalen Energiefläche, die von kollektiven Freiheitsgraden der Kerne wie Abstand, Deformation usw. und den Einteilchenfreiheitsgraden der Nukleonen aufgespannt ist. Der wichtigste Ordnungsparameter ist der Schwerpunktsabstand r zwischen Projektil und Target. Für einen gegen spontane Spaltung stabilen Compoundkern existiert eine durch die Kernkräfte erzeugten Potentialtasche um $r = 0$, die durch eine von der Coulombabstoßung verursachten Barriere von dem Bereich der Streuzustände getrennt ist. Um zu verschmelzen, müssen die Kerne einen Weg auf der Energiefläche finden, der sie ausgehend vom ihrer Grundzustandsform bei großen Abständen über die Barriere führt, um nach Dissipation oder Abstrahlung der überschüssigen Energie in der Tasche eingefangen zu werden.

Der Fusionswirkungsquerschnitt ergibt sich in Partialwellenentwicklung zu /4/

$$\sigma_f = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) T_{\ell} P_{\ell} \quad (1.1)$$

wobei k_0 der asymptotische Wellenvektor, T_{ℓ} die Transmissionswahrscheinlichkeit der ℓ -ten Partialwelle durch die Barriere, und P_{ℓ} die Wahrscheinlichkeit dafür ist, daß der transmittierte Fluß auch wirklich eingefangen wird und fusioniert.

Da eine exakte Beschreibung des Einfangens, das heißt der Dissipation der vom Compoundkern aufgenommenen kinetischen Energie auf seine inneren Freiheitsgrade bzw. deren Abgabe als Gammaquanten oder durch Teilchenemission, sehr schwierig ist, setzt man häufig die Koeffizienten $P_{\ell} = 1$, bzw. schließt sie in die Modelle zur Berechnung des Transmissionskoeffizienten T_{ℓ} ein (siehe z.B. Ref. /45/).

Hinter diesem Ansatz steht die Vorstellung, daß Anregungen innerer Freiheitsgrade, die als Dissipation beschrieben werden können, außerhalb

und im Bereich der Barriere, wo sich die Kerne noch nicht, oder zumindestens nur sehr wenig überlappen, noch keine wichtige Rolle spielen, so daß für den Tunnelprozess nur die Bewegung in den kollektiven Freiheitsgraden betrachtet werden muß. Andererseits sind diese dissipativen Prozesse innerhalb der Barriere so effektiv, daß in jedem Fall ein Fusionskern gebildet wird.

Die wesentlichen Methoden zur Beschreibung des Flusses in Fusionskanäle sind folgende : Verwendung von Randbedingungen mit (in den Kern) einlaufenden Wellen (ingoing wave boundary condition, IWBC) /46/, von Reibungskräften /45,47/, oder Absorption durch optische Potentiale /24/.

Bei der IWBC wird angenommen, daß aller Fluß, der die Barriere durchdrungen hat, auch zur Fusion beiträgt (d.h. $P_f = 1$). Für praktische Rechnungen extrapoliert man die Innenseite der Barriere für $r \rightarrow -\infty$ glatt nach $V \rightarrow 0$, z.B. durch 'Abschneiden' eines inneren, abstoßenden Kerns ('Core'), und verwendet als Randbedingung, daß die Wellenfunktion für $r \rightarrow -\infty$ asymptotisch in eine nach $-\infty$ auslaufende ebene Welle übergeht.

Optische, d.h. komplexe, Potentiale dienen allgemein dazu, die Anregung von in einer Rechnung nicht explizit berücksichtigten Kernzuständen (Kanäle) einzubeziehen. Dabei beschreibt der Imaginärteil des Potentials Verlust von Fluß (Absorption) aus dem betrachteten Teil-Hilbertraums in diese anderen Kanäle. Da einfache Reaktionen wie inelastische Anregung und Transfer, sogenannte direkte Reaktionen, weitgehend außerhalb, Fusion aber innerhalb der Barriere stattfindet, kann man den Imaginärteil W des optischen Potentials zerlegen in einen Fusionsanteil und einen Anteil direkter Reaktionen :

$$W = W_f + W_r$$

wobei qualitativ W_f innerhalb und W_r außerhalb der Barriere lokalisiert

ist /24/.

Eine weitere Möglichkeit bietet – vor allem im Zusammenhang mit semiklassischen Rechnungen – die Verwendung von Reibung. Sie stellt eine klassische Beschreibung der Energiedissipation auf die vielen inneren Freiheitsgrade dar.

Quantenmechanisch läßt sich Dissipation nur näherungsweise und mit großem Aufwand beschreiben. Dazu wurden unter anderem nichtlineare Schrödingergleichungen untersucht /47/, jedoch nicht auf Fusionsreaktionen angewendet.

1.1 Eindimensionale Modelle

Bei eindimensionalen Modellen wird die Transmission durch die Barriere, die sich aus dem Zusammenspiel von Kern-, Coulomb- und Zentrifugalpotential ergibt, untersucht. Sie kann klassisch, semiklassisch und quantenmechanisch berechnet werden.

1.1.1 Berechnung des Wirkungsquerschnitts

Klassisch erhält man, daß das Projektil für Einschußenergien ober- (unter-) halb der Barriere vollständig transmittiert (reflektiert) wird. Das bedeutet, daß alle Partialwellen bis zu einem maximalen Wert $\ell_{\max}$ mit der Wahrscheinlichkeit 1 zur Fusion beitragen (sharp cutoff). Der Wirkungsquerschnitt ergibt sich zu

$$\sigma_f = \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell=0}^{\ell_{\max}} (2\ell + 1) = \frac{\pi}{k_0^2} (\ell_{\max} + 1)^2 \approx \pi r_b^2 \left(1 - \frac{V_b}{E} \right) \quad (1.2)$$

wobei r_b den Ort, $V_b = V(r_b)$ die Höhe der Barriere darstellt und k_0 die asymptotische Wellenzahl ist. Die letzte Identität gilt für große $\ell_{\max}$.

Bei semiklassischen Rechnungen wird die Barriere durch eine umgekehrte Parabel gleicher Höhe und Scheitelkrümmung approximiert. Man erhält die Hill – Wheeler Formel /2 / :

$$T_\ell = \left[1 + e^{(V_\ell - E)/\varepsilon_\ell} \right]^{-1} \quad (1.3)$$

Dabei ist $V_\ell = V_b + \hbar^2 \ell(\ell+1)/r_b^2$ die Höhe der Barriere für die ℓ -te Partialwelle, r_b ihre Position und $\varepsilon_\ell = \frac{\hbar}{2\pi} \sqrt{V''(r_b)}/\mu$ ein Maß für ihre Krümmung und damit auch ihre Dicke.

Setzt man $\varepsilon_\ell = \varepsilon_0$ und ersetzt die Partialwellensumme durch ein Integral so erhält man aus (1.3) die Wong - Formel /30/ für den Wirkungsquerschnitt :

$$\sigma_w = \pi r_b^2 \frac{\varepsilon_0}{E} \ln \left[1 + e^{(E - V_b)/\varepsilon_0} \right] \quad (1.4)$$

Durch Einführung von Reibungskräften und Lösen der klassischen Hamilton Gleichungen bis zum klassischen Umkehrpunkt kann die Energiedissipation vor dem Tunneln berücksichtigt werden. Diese Vorgehensweise entspricht einer Änderung der asymptotischen kinetischen Energie. Zur Berechnung der Transmission werden semiklassische Verfahren z.B. Gl. (1.3) oder (1.4) verwendet, bei denen die Reibung vernachlässigt wird /45/. Da unter der Barriere besonders starke Kopplungen auftreten, erwartet man dort hohe Energiedissipation. Die Vernachlässigung der Reibung ist gerade in diesem Bereich theoretisch kaum zu begründen.

Die Hill - Wheeler Approximation unterschätzt bei realistischen Kernpotentialen die Breite der Barriere und ergibt daher für Energien weit darunter zu große Transmissionen.

Dieser Fehler läßt sich vermeiden, wenn man den WKB - Ausdruck für die Transmission für das exakte Potential benutzt /48/

$$P_\ell(E) = \left\{ 1 + \exp \left[- \frac{2}{\hbar} \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{2m(V_\ell(r) - E)} \, dr \right] \right\}^{-1} \quad (1.5)$$

r_1 und r_2 sind die klassischen Umkehrpunkte.

Eine quantenmechanisch exakte Lösung erfordert die Lösung der

Schrödingergleichung mit entsprechenden Randbedingungen (z. B. IWBC). Für eindimensionale Systeme ist dies numerisch problemlos durchzuführen /49/.

1.1.2 Potentiale

Die einzige Freiheit bei eindimensionalen Fusionsrechnungen liegt somit in der Wahl der Radialabhängigkeit des Kern – Kern Potentials. Im Prinzip könnte man auch eine Ortsabhängigkeit des Trägheitsparameters berücksichtigen, von dem man ja nur bei großen Abständen weiß, daß er gleich der reduzierten Masse des Systems ist. Mangels besserer theoretischer Vorstellungen wird er im allgemeinen überall gleich der reduzierten Masse gesetzt.

In Ref. /4/ vergleichen Vaz, Alexander und Satchler eindimensionale Fusionsrechnungen für Energien nahe der Barriere und für eine Reihe relativ leichter Systeme, wobei verschiedene Potentiale verwendet werden.

Wie bereits in der Einleitung erwähnt, gelingt es mit eindimensionalen Modellen die Fusion leichter Systeme mit $Z_1 Z_2 \leq 80$ zu beschreiben. Für schwerere Systeme, bei denen zusätzliche Freiheitsgrade wichtig werden, zeigen sich jedoch die bereits diskutierten Diskrepanzen zum Experiment. Man sollte aber erwarten, daß Potentiale, mit denen die Fusion leichter Kerne gut beschrieben werden kann, auch die Abhängigkeit der Wechselwirkung bezüglich der Radialbewegung schwerer Kerne richtig wiedergeben.

Folgende Potentialmodelle sind untersucht worden :

Das Doppelfaltungspotential von Krappe, Nix und Sierk /50/, bei dem eine empirische Nukleon – Nukleon Wechselwirkung (Überlagerung von Yukawa – und Exponentialpotential) über eine homogene Dichteverteilung gefaltet wird, sowie dasjenige von Satchler und Love /51/, bei der eine aus mikroskopischen Rechnungen abgeleitete Wechselwirkung

(M3Y) mit Schalenmodell oder Hartree – Fock Dichten gefaltet wird, ergibt eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen /4/.

Das Proximity Potential von Blocki et al. /37/ ist proportional zu dem Potential je Flächeneinheit zwischen zwei unendlich ausgedehnten Scheiben Kernmaterie, das letztlich durch die Oberflächenenergiekonstante der Massenformel bestimmt ist, wobei der Proportionalitätsfaktor ein Maß für die mittlere Krümmung der beiden Objekte ist. Es erweist sich im allgemeinen als zu wenig attraktiv. Auch ein parametrisiertes Woods – Saxon Potential /38/ ergibt keine gute Beschreibung der Daten.

Wir haben für unsere Rechnungen das numerisch einfach zu handhabende Krappe – Nix – Sierk Potential verwendet.

1.2 Zweidimensionale Rechnungen

Die Berücksichtigung zusätzlicher Freiheitsgrade erhöht die Komplexität des Tunnelproblems erheblich. Deshalb wurden verschiedene, mehr oder weniger schematische Methoden entwickelt, solche Freiheitsgrade berücksichtigen, die im folgenden kurz charakterisiert werden sollen.

1.2.1 Nullpunktsschwingungen

Als einfachstes Verfahren, zusätzliche Freiheitsgrade zu berücksichtigen, ohne deren Dynamik explizit zu berechnen, wurde das Modell der Nullpunktsschwingungen (zero point motions) /15,16/ entwickelt. Esbesen et al. fassen die diffuse Oberfläche eines Kerns als Überlagerung von Vibrations – Zuständen eines Kerns mit scharfem Rand auf. Man erhält eine Verteilungsfunktion der fluktuierenden Größe, d.h. für das Vibrations Modell /54/ eine Gaußsche Verteilung der Radien

$$g(r) = e^{-\frac{(r-R)^2}{2\sigma^2}}, \quad (1.6)$$

wobei R den äquivalenten scharfen Radius des sphärischen Kerns, und σ die Breite der Verteilung der Deformationen, das heißt die mittlere Amplitude der Schwingung um die sphärische Form ist. Als Konsequenz ergibt sich für jeden Radius ein anderer Wert der Barriere. In Ref. /15/ wird die Fluktuation der Barriere in ein effektives Zentrifugalpotential einbezogen.

In diesem Modell läßt sich der Fusionswirkungsquerschnitt schreiben als

$$\sigma_f(E) = \int dx \, g(x) \sigma_0(E + \Delta E(x)) \quad (1.7)$$

wobei $\sigma_0(E)$ den Wirkungsquerschnitt für die Barriere sphärischer Kerne bei der Energie E bedeutet und $\Delta E(x)$ die Änderung ihrer Höhe im Zustand x . Man erhält bei manchen Systemen eine gute Übereinstimmung mit der Meßwerten, bei anderen bleibt eine große Diskrepanz. Wie schon diskutiert führt aber die Vernachlässigung der Dynamik zu einer Überschätzung der Fusion.

Landowne und Nix /33/ erweiterten diesen Ansatz um die Dynamik eines zweiten Freiheitsgrades, indem sie für jeden (Deformations -) Anfangszustand die klassischen Hamiltongleichungen in einem zweidimensionalen Potential bis zum klassischen Umkehrpunkt lösten, und von da aus bei konstant gehaltener Deformation die Transmission mit der eindimensionalen Hill - Wheeler Formel berechneten. Es gelang nicht, die experimentellen Daten zu beschreiben. Die Ergebnisse dieser Rechnungen werden in Kapitel 3.4 mit quantenmechanisch exakten Resultaten verglichen.

Diese dynamischen Effekte kann man im Nullpunktschwingungs - Modell näherungsweise berücksichtigen, indem man die Bewegung des Mittelpunkts der Verteilung der Zustände berechnet. Man spricht von einem mittlerern dynamischen Weg (average dynamical path). Das

System trifft dann die Barriere an einer anderen Stelle als im eindimensionalen Fall (vergl. Kap 4). Die Barrierenhöhe ändert sich um einen Betrag ϵ , die sogenannte Barrierenverschiebung (barrier shift). Gleichung (1.7) geht dann über in

$$\sigma_f(E) = \int dx \, g(x) \sigma_0(E + \Delta E(x) + \epsilon) \quad (1.8)$$

Die Einbeziehung der Dynamik führt zu reduzierter Fusion gegenüber dem ursprünglichen Nullpunktsschwingungs – Modell /15,33/. Diese Tatsache wird in Kapitel 3.4 genauer untersucht und diskutiert.

1.2.2 Mehrdimensionales Tunneln

Die exakte quantenmechanische Behandlung des Tunnelns durch eine mehrdimensionale Barriere erfordert die Lösung einer mehrdimensionalen Schrödingergleichung. Auf Grund der Schwierigkeit dieses Problems wurden in den letzten Jahren eine Anzahl von Näherungen dafür entwickelt. Man kann sie einteilen in semiklassische Näherungen und exakte oder approximative quantenmechanische Lösungen für meist einfache Modellpotentiale.

Um die Halbwertszeit spontaner Spaltung zu berechnen, nahmen Brack et al. /42/ und Ledergerber und Pauli /43/ an, daß der Kern aus seinem Grundzustand einen Weg über die multidimensionale Barriere wählt, der den eindimensionalen WKB Ausdruck für die Transmission maximiert. Auf diese Weise kann man semiklassisch eine Bahn der Kerne auch unter der Barriere festlegen.

Bei Potentialflächen, mit denen Fusionsreaktionen beschrieben werden, befindet sich ein oft sehr niedriger Sattel an einer Seite des 'Fusionstals'. Damit ist das Potentialminimum gemeint, das asymptotisch für große Radien zum Grundzustand der freien Kerne führt, d.h. in welchem also die Kerne einlaufen. Die Annahme, daß sich das System in diesem Potentialminimum bewegt, d.h. daß alle dynamischen Effekte vernachlässigt

sigt werden, entspricht der adiabatischen Näherung. Diese erhält man unter der Annahme, daß die zusätzlichen Freiheitsgrade sich stets instantan dem Minimum des Potentials anpassen können. Diese Näherung stellt eine obere Grenze für die Transmission dar.

Hofmann /12/ wendete die WKB – und Bornsche Näherung auf einen Hamiltonoperator der Form

$$H = - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m_x(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{m_y(x)} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x) + \frac{m_y}{2} \omega^2(x) y^2 \quad (1.9)$$

an, d.h. auf ein radiales Potential $V(x)$ mit einem angekoppelten harmonischen Oszillatorpotential ortsabhängiger Öffnung, wobei die Massen vom Ort abhängig sind. Er konnte zeigen, daß die Transmission durch eine solche Barriere in erster Bornscher Näherung gleich ist zu der Transmission durch eine eindimensionale Barriere, die durch folgendes adiabatische Potential beschrieben wird

$$V_{ad}(x) = V(x) + \frac{\hbar}{2} \left[\omega(x) - \omega(x \rightarrow \infty) \right] \quad (1.10)$$

Das heißt daß die Höhe der Barriere entsprechend der Änderung der Grundzustandsenergie des Oszillators verschoben wird. Da das Fusions-tal sich in der Umgebung des Sattelpunkts aufweitet, kann man schon aus diesem Argument rein qualitativ auf eine Erhöhung des Wirkungs- querschnitts schließen. Direkt ist dieses Verfahren auf Fusionspotentiale meist nicht anwendbar, da hierbei oft zwei durch einen Grat getrennte nebeneinander laufende Täler (misaligned valleys) auftreten, das Fus- ions – und das Fissionstal, die sich nicht auf einen geraden Weg abbilden lassen.

Zur Berechnung chemischer Reaktionsraten hat Miller /44/ eine Me- thode für das Tunneln durch multidimensionale Barrieren entwickelt, die darauf beruht, klassische Bewegungsgleichungen für komplexe Zeiten zu lösen. Ring et al. /13/ haben diese Methode für Energieflächen, wie sie sich aus Gl (1.9) ergeben, angewendet. Millers Methode läßt sich

allerdings numerisch schwierig handhaben.

Kodama et al. /14/ lösten für ein Potential der Form

$$V(r, \sigma) = V_0 - k_r(r - r_0)^2 + V(\sigma)$$

mit

$$V(\sigma) = k_1(\sigma - \sigma_1)^2 \quad r \geq r_1$$

$$V(\sigma) = k_2(\sigma - \sigma_2)^2 - k_2(\sigma_2 - \sigma_1)^2 \quad r < r_1$$

d.h. für eine parabolische Barriere mit zwei unstetig zusammengesetzten harmonischen Oszillatoren im zweiten Freiheitsgrad die Schrödingergleichung exakt. Durch die Unstetigkeiten des Potential ergeben sich unphysikalische Spitzen in den Transmissions Funktionen. Jedoch läßt sich bereits aus diesem einfachen Modell qualitativ eine deutliche Erhöhung der Tunnelwahrscheinlichkeit gegenüber dem eindimensionalen Modell ableiten.

1.2.3 Die Methode gekoppelter Kanäle

Der Formalismus für gekoppelte Kanäle (coupled channel - CC) /55/ bildet in der Theorie der direkten Reaktionen /23/ die Basis zur Beschreibung elastischer und inelastischen Reaktionen. Er stellt eine Möglichkeit dar, zusätzliche Freiheitsgrade auf ein eindimensionales Vielkanalproblem abzubilden. Der Hamiltonoperator läßt sich in folgender Form schreiben

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r) + h_i(\vec{x}) + V_c(r, \vec{x}) \quad (1.11)$$

wobei h_i den Hamiltonoperator für die innere Energie, d.h. für die inneren Freiheitsgrade $\vec{x}$ der Stoßpartner, und V_c das Kopplungspotential zwischen der Relativbewegung und den inneren Freiheitsgraden bedeutet. Definiert man die Eigenzustände $|m\rangle$ der inneren Energie h_i durch

$$h_i |m\rangle = \epsilon_m |m\rangle$$

so läßt sich die Lösung $|\Psi\rangle$ der Schrödingergleichung

$$H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (1.12)$$

folgendermaßen entwickeln

$$|\Psi\rangle = \sum_m \chi_m(r) |m\rangle \quad (1.13)$$

Die CC - Gleichungen ergeben sich durch Einsetzen von (1.13) in (1.12) und Projektion mit $\langle n|$ zu

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) - E \right] \chi_n(r) = - \sum_m F_{n,m} \chi_m(r), \quad (1.14)$$

wobei die Kopplungsmatrix $F_{n,m} = \langle n | h_i + V_c | m \rangle$ alle kanalabhängigen Energien einschließt. Die Funktionen $|m\rangle$ umfassen alle gebundenen und Kontinuumszustände der beiden Kerne - somit also auch die Fusionszustände.

Da man in praktischen Rechnungen immer nur eine endliche Anzahl von inneren Wellenfunktionen (Kanälen) mit einbeziehen kann, verwendet man effektive Potentiale, die den Einfluß der vernachlässigten Kanäle berücksichtigen. Sie sind eine Verallgemeinerung des komplexen optischen Potentials, das zur Beschreibung der elastischen Streuung verwendet wird, auf den Fall mehrerer gekoppelter Kanäle. Bei Fusionsrechnungen im Coupled Channel Formalismus werden meist reelle Potentiale und eine Ingoing Wave Boundary Condition angenommen, da versucht wird, alle für den Fusionsvorgang relevanten Kanäle explizit einzubeziehen.

Landowne et al. /18 - 22/ konnten mit schematischen Modellen und durch explizite Rechnungen zeigen, daß durch Ankopplung zusätzlicher Kanäle eine Erhöhung der Transmission erreicht werden kann.

Als einfachstes Modell betrachten sie ein System mit zwei Kanälen,

einem diagonalen Radialpotential $V(r)$ und einem ortsunabhängigen Kopplungsterm V_c (constant coupling model /18/)

$$\chi''_{0/1} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - V(r)] \chi_{0/1} + V_c \chi_{1/0} = 0 \quad (1.15)$$

Die Schrödingergleichung (1.15) läßt sich entkoppeln zu

$$\chi''_{\pm} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(r) \pm V_c] \chi_{\pm} = 0 \quad (1.16)$$

wobei $\chi_{\pm} = \chi_0 \pm \chi_1$ die Summe bzw. Differenz aus der Wellenfunktion des Grund- und des angeregten Zustand ist. Die Barriere V_b des Diagonalpotentials spaltet somit in zwei um $\pm V_c$ in der Energie verschobene Teile auf. In klassischer Näherung zerfällt die ursprüngliche Transmissionsfunktion

$$T(E) = \Theta(E - V_b^{\text{eff}})$$

in drei Bereiche :

$$\begin{aligned} T(E < V_b - V_c) &= 0 \\ T(V_b - V_c < E < V_b + V_c) &= 1/2 \\ T(V_b + V_c < E) &= 1 \end{aligned}$$

Abb. 3a zeigt die Transmission im klassischen Grenzfall, Abb. 3b die Abhängigkeit der entsprechenden quantenmechanischen Funktionen.

Dieses Modell ist in Ref. /19/ und /56/ auf mehrere Kanäle erweitert worden. Da die Kopplung nur im Bereich der Barriere eine Rolle spielt, nimmt man in diesem Modell an, daß die Kopplungsmatrix für alle Radien den Wert an der Barriere hat :

$$F_{j,k}(r) = F_{j,k}(r_b)$$

und erhält als Schrödinger Gleichung

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \chi_k + V(r) \chi_k + \sum_j F_{k,j} \chi_j = E \chi_k \quad (1.17)$$

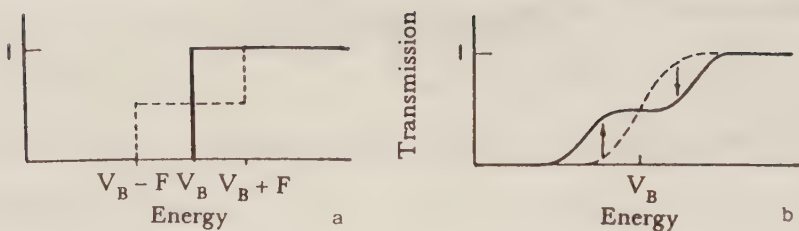


Abb. 3. Transmission durch eine Barriere mit (durchgezogene Linie) und ohne Kopplung (gestrichelt) in klassischer Näherung (3a) und quantenmechanisch (3b) berechnet. Unter - / oberhalb der Barriere bewirkt die Kopplung eine Anhebung / Absenkung der Transmission gegenüber dem eindimensionalen Wert (aus Ref. /21/)

Bezeichnet man mit $U_{k,j}$ die unitäre Transformation, die die Kopplungsmatrix diagonalisiert,

$$\sum_{k,\ell} U_{i,k} F_{k,\ell} U_{\ell,j} = \lambda_i \delta_{i,j}$$

lassen sich die gekoppelten Gleichungen entkoppeln :

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \varphi_j + [V(r) + \lambda_j] \varphi_j = E \varphi_j \quad \text{mit } \varphi_j = \sum_k U_{j,k} \chi_k \quad (1.18)$$

Die Barriere spaltet nun in ein Ensemble von Barrieren für die einzelnen Kanäle auf. Die Transmission für eine im Grundzustand einlaufende Welle ergibt sich zu

$$T = \sum_k T(E - \lambda_k) |U_{k,0}|^2 \quad (1.19)$$

Der Faktor $|U_{m,0}|^2 = |\langle m|0\rangle|^2$ gibt die Projektion des Grundzustands auf den m -ten entkoppelten Kanal an. Da die spurlose Kopplungsmatrix immer mindestens einen negativen Eigenwert hat /21/, und

die Tunnelwahrscheinlichkeit unterhalb der Barriere exponentiell mit der Energie ansteigt, erhöht sich die Transmission besonders bei niedrigen Energien.

Es zeigt sich jedoch, daß das Constant Coupling Modell nur eine schlechte Näherung an exakte Coupled Channel Rechnungen darstellt. Die Vernachlässigung der Ortsabhängigkeiten der Kopplung ergibt einen falschen Wert für Höhe und Ort der Barriere und einen Fehler von bis zu 2 Größenordnungen in der Anregungsfunktion /57,58/.

Die unphysikalische Annahme einer konstanten Kopplung wird im Modell der adiabatischen Barriere /58/ aufgegeben. Diagonalisiert man die exakte Kopplungsmatrix für jeden Radius werden die Transformationsmatrix U und die Eigenwerte ortsabhängig :

$$\sum_{k,\ell} U_{i,k}(r) F_{k,\ell}(r) U_{\ell,j}^{\dagger}(r) = \lambda_i(r) \delta_{i,j}$$

Die gekoppelten Gleichungen gehen über in

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} \chi_k + \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) + \lambda_k(r) - E] \chi_k = \sum_{j,\ell} U_{k,j}^{\dagger} (U_{j,\ell}'' \chi_{\ell} + 2U_{j,\ell}' \chi_{\ell}') \quad (1.20)$$

Die Kopplung der Kanäle wird in dieser Darstellung durch Trägheitsterme bewirkt, die Ableitungen der Transformationsmatrix U sind. Bei niedrigen Energien (Geschwindigkeiten) ist die Trägheit gering und man kann die rechte Seite von (1.20) vernachlässigen.

Asymptotisch verschwindet die Kopplung und $U_{k,\ell} \rightarrow \delta_{k,\ell}$. Für Energien unterhalb der Barriere ist der Grundzustand energetisch bevorzugt. Die Streuung in angeregte Zustände spielt keine Rolle und die Welle tunnelt effektiv nur durch die 'adiabatische Barriere' :

$$V_{ad} = V(r) + \lambda_0$$

In dieser Näherung kann man sich darauf beschränken, ein eindimensionales Problem zu lösen. Erst wenn die Energie den Bereich der Barriere erreicht, spielen höher angeregte Kanäle eine Rolle, so daß man

die gekoppelten Gleichungen lösen muß. Im Vergleich zum Constant Coupling Modell ist die adiabatische Barriere nicht nur in der Höhe, sondern auch im Ort und ihrer Scheitelkrümmung gegenüber der eindimensionalen verändert. Die Ergebnisse vollständiger Coupled Channel Rechnungen werden für Energien unterhalb der Barriere gut reproduziert.

Im Grenzfall verschwindender Anregungsenergien ($\epsilon_i = 0$), wenn alle 'angeregten' Zustände mit dem Grundzustand energetisch entartet sind, ergibt die Diagonalisierung gekoppelter Gleichungen den zero-point-motion Formalismus /15,20,26/.

Numerisch lassen sich die CC - Gleichungen durch direkte Integration lösen /59/. Dabei werden niedrig angeregte Zustände der Kerne als Rotationen oder Vibrationen behandelt. Trotz einer hohen Zahl von Kanälen ist gute Übereinstimmung mit dem Experiment für eine Vielzahl von Reaktionen nicht oder nur durch eine Anpassung von Kopplungsstärken zu erzielen /57/.

Für die Erklärung der Abweichungen könnten zwei Gründe maßgebend sein :

(1) Freiheitsgrade des Systems aus zwei Kernen in geringem Abstand, wie z.B. Halsbildung, lassen sich nur schlecht nach niedrig angeregten Zuständen der isolierten Kerne entwickeln; die übliche Entwicklung nach Kugelflächenfunktionen würde eine außerordentlich große Zahl von Termen erfordern.

(2) Transfer - Reaktionen beeinflussen die Fusion. Experimentell zeigt sich bei Systemen, bei denen ein Zwei - Nukleonen Transferkanal mit positivem Q - Wert existiert, eine deutliche Erhöhung der Fusionswahrscheinlichkeit gegenüber ähnlichen Systemen ohne einen solchen /7/. Ein - Nukleon Transfer mit positivem Q - Wert scheint jedoch zu keinen großen Änderungen in den Anregungsfunktionen zu führen /50/. Dieser Umstand ist theoretisch noch nicht verstanden.

In mehreren Arbeiten wird Transfer im Coupled Channel Modell wie inelastische Anregungen behandelt /21,57/. Dabei werden entsprechend parametrisierte Kopplungsstärken verwendet. Bei einigen Systemen wird dabei eine gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt. Es ist jedoch zu bedenken, daß der Q -Wert einer Reaktion nur asymptotisch für Kerne, die sich wieder auseinanderbewegen, definiert ist. Bei Fusionsreaktionen spielt ein Transfer aber ausschließlich im Wechselwirkungsbereich ab, während sich die Kerne aufeinander zu bewegen. Hier erzeugt ein transferiertes Nucleon einen Rückstoß, der kinematisch zu einer Abstoßung der Kerne führt. Die Vernachlässigung des Rückstoßes (No Recoil Näherung) kann daher den Transferbeitrag zur Fusion überschätzen. Jedoch könnte die zusätzlich verfügbare innere Energie (aus der Transferreaktion) dazu beitragen Zustände (wie z.B. starke Deformationen oder Riesenresonanzen) anzuregen, die die Fusion begünstigen, ohne Transfer aber energetisch schwer erreichbar sind.

1.3 Das Modell für direkte Reaktionen

Einen anderen, von der Theorie der direkten Reaktionen ausgehenden Ansatz entwickelten Tamura, Udagawa und Kim /24/. Löst man die Schrödingergleichung für ein optisches Potential das die elastische Streuung beschreibt

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} |\psi\rangle + [V(r) + iW(r)] |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (1.21)$$

so stellt das Matricelement

$$A = \frac{2\mu}{\hbar^2 k} \langle \psi | W | \psi \rangle = \frac{2\mu}{\hbar^2 k} \int dr W(r) |\psi(r)|^2$$

den absorbierten Anteil der Welle dar. Man kann A nun in einen elastischen und einen Fusionsanteil aufteilen

$$A = A_i + A_f = \int dr W(r) |\psi(r)|^2 [1 - P_t(r)] + \int dr W(r) |\psi(r)|^2 P_t(r)$$

wobei $P_f(r)$ mit $0 < P_f < 1$ den Anteil der Fusion an der Gesamtab-
sorption beim Radius r darstellt. Da die Absorption bei großen Radien
durch direkte Kanäle (inelastische Anregung und Transfer), bei klei-
nen dagegen durch Fusion verursacht wird, wird in /24/ angenommen,
daß man P_f durch eine Stufenfunktion approximieren kann :

$$P_f(r) = \Theta(R_f - r)$$

wobei $R_f = r_f A^{1/3}$ ist, mit einem (für alle Systeme individuell aber
unabhängig von der Energie angepaßten) r_f im Bereich von 1.35 bis
1.5 fm. Mit diesem einfachen empirischen Ansatz wurde eine sehr gute
Beschreibung vieler Fusionsdaten erzielt.

Der Zusammenhang dieses Ansatzes mit mehrdimensionalen und damit
auch CC - Rechnungen läßt sich wie folgt verstehen : In mehrdimen-
sionalen Potentialflächen ist der Ort der Barriere r_b eine Funktion der
anderen Freiheitsgrade $\vec{s}$:

$$r_b = r_b(\vec{s})$$

Für hinreichend kleine Abstände r ergibt sich eine gewisse (ortsabhän-
gige) Wahrscheinlichkeit, daß dort Fluß die Barriere durchdringt.

$$W(r) |\Psi(r)|^2 P_f(r) dr = S(r, \vec{s}(r)) \vec{n}_b dr \quad (1.22)$$

Dabei ist $S(r, \vec{s}_b(r))$ der Fluß der Wellenfunktion an der Stelle
 $(r, \vec{s}_b(r))$ und $\vec{n}_b$ bedeutet einen Normalenvektor auf die Barriere. Es
wird angenommen, daß der Fluß, der am Maximum der Barriere nach
innen fließt ($\partial \Psi / \partial r < 0$!), zur Fusion führt, entsprechend der Annah-
me der Ingoing Wave Boundary Condition.

Ein Nachteil dieser Vorgehensweise ist es, daß die physikalischen
Vorgänge, die zur Fusion bzw. zur Erhöhung des Wirkungsquerschnitts
führen, völlig im Dunklen bleiben. Eine Verbesserung ließe sich durch
Verwendung von Coupled Channel Rechnungen erzielen. Damit ließen

sich die relativen Beiträge der verschiedenen Kanäle zur Fusion und möglicherweise individuelle 'Fusionsradien' $r_{f,k}$ für die verschiedenen Kanäle k ermitteln.

2. Der Wellenpaketalgorithmus

Die Darstellung im letzten Abschnitt zeigt, daß bei der Beschreibung des mehrdimensionalen Tunnelns durchaus noch Schwierigkeiten existieren, entweder bei der richtigen Beschreibung des Tunnelwegs oder bei der Wahl der relevanten Freiheitsgrade.

Eine Methode, die ebenfalls eine quantenmechanisch exakte Lösung des Tunnelproblems liefert, aber den intuitiven Vorstellungen der klassischen Mechanik am nächsten kommt, ist die zeitabhängige Propagation von Wellenpaketen. Dabei wird der Weg, den das System auf der Energiefläche zurücklegt durch die Dynamik bestimmt, muß also nicht von außen vorgegeben werden.

Im folgenden Abschnitt soll zuerst die dem üblichen stationären Wirkungsquerschnitt entsprechende Größe bei der Streuung von Wellenpaketen (Wellenpaketwirkungsquerschnitt), sowie der Zusammenhang zwischen beiden erläutert werden. Dann wird der Algorithmus, mit dem die Zeitentwicklung durchgeführt wird, beschrieben.

2.1 Wellenpaketwirkungsquerschnitte

Die bei Streuexperimenten gemessene Variable ist der differentielle Wirkungsquerschnitt. Er ist definiert als die Wahrscheinlichkeit, daß ein einfallendes Teilchen von einem Zähler registriert wird, der vom Streuzentrum aus gesehen in der Richtung Ω das Raumwinkelement $d\Omega$ überdeckt, oder äquivalent dazu, als das Verhältnis aus dem in Richtung Ω gestreuten Fluß $J_{sc}(\Omega)$ und dem pro Flächeneinheit einfallenden J_0

$$d\sigma = W(\Omega)d\Omega = \frac{J(\Omega)d\Omega}{J_0}.$$

Betrachtet man ein normiertes einfallendes Wellenpaket (entsprechend einem einfallenden Teilchen), so ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, daß das Teilchen in dem Zähler aufgefangen wird, durch Integration des Flusses durch die Fläche des Zählers ($dA = r^2 d\Omega$) über alle Zeiten.

$$W(\Omega)d\Omega = r^2 d\Omega \int dt J_{sc}(\Omega, t) \quad (2.1)$$

Für große Zeiten ($t \rightarrow \infty$) hat die gesamte Streuwelle die Fläche dA passiert und befindet sich im asymptotischen Bereich ($r \rightarrow \infty$) des durch dA aufgespannten Kegelstumpfs mit dem Streuzentrum als Spitze. Dort verschwindet der tangentielle Fluß durch den Kegelmantel. Man kann Gleichung (2.1) mittels der Kontinuitätsgleichung und des Gaußschen Satzes umformen zu

$$W(\Omega) = \lim_{t \rightarrow \infty} \int dr r^2 |\Psi(r, t)|^2 \quad (2.2)$$

Den Übergang zum stationären Wirkungsquerschnitt erhält man nach Mittelung über alle Stoßparameter für verschwindende Energieunschärfe des Wellenpakets /35/.

Untersucht man die Streuung von Wellenpaketen endlicher Breite, muß deren Energieunschärfe berücksichtigt werden. Zur Vereinfachung soll zunächst der eindimensionale Fall betrachtet werden /36/.

2.1.1 Eindimensional

Die stationäre Lösung der Schrödingergleichung geht asymptotisch über in

$$\varphi_k(x \rightarrow +\infty) = e^{-ikx} + r(k) e^{ikx}$$

$$\varphi_k(x \rightarrow -\infty) = t(k) e^{-ikx}$$

Der erste Term in der ersten Zeile ist die einfallende ebene Welle, der zweite und der darunterstehende stellen die reflektierte bzw. transmittierte Welle dar. Die $r(k)$ bzw $t(k)$ sind die Reflexions- bzw. Transmissionskoeffizienten. Für $t \rightarrow \pm\infty$ kann man das Wellenpaket nach diesen asymptotischen Eigenfunktionen entwickeln.

$$\Psi(x, t \rightarrow \pm\infty) = \lim_t \int dk a(k) \varphi_k(x) e^{-i\omega t} \quad (2.3)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk a(k) \left\{ \Theta(x) [e^{-ikx} + r(k)e^{ikx}] + \Theta(-x) t(k)e^{-ikx} \right\} e^{-i\omega(k)t}$$

$\omega(k) = \hbar k^2/2m$ ist die Energie der Welle mit dem Impuls k . In Gleichung (2.3) wurde angenommen, daß die Impulsverteilung des Wellenpakets so schmal ist, daß $a(k)$ für negative k verschwindet. In Ref. /36/ wird gezeigt, daß die nachfolgenden Ergebnisse von dieser Annahme nicht abhängen.

Die Wellenpaketwirkungsquerschnitte, d.h. in einer Dimension die Transmissions- und Reflexionswahrscheinlichkeit, ergeben sich zu

$$T_{WP} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int dx |\Psi(x,t)|^2 \quad (2.4)$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{i}{2\pi} \int dx \int dk d\hat{k} a(k) a^*(\hat{k}) t(k) t^*(\hat{k}) e^{i(k-\hat{k})x - i(\omega-\hat{\omega})t} \\ &= \frac{1}{2} \int dk |a(k)t(k)|^2 + \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int dk d\hat{k} a(k) a^*(\hat{k}) t(k) t^*(\hat{k}) \frac{e^{-i(\omega-\hat{\omega})t}}{(k-\hat{k})^2} \\ &= \int dk |a(k)|^2 |t(k)|^2 = \int dk |a(k)|^2 \sigma_t(k) \end{aligned}$$

$$\text{und analog} \quad (2.5)$$

$$R_{WP} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int dx |\Psi(x,t)|^2 = \int dk |a(k)|^2 |r(k)|^2 = \int dk |a(k)|^2 \sigma_r(k)$$

dabei wurde verwendet /61/

$$\int dx \Theta(\pm x) e^{\pm ikx} = \pi \delta(k) + iP\left(\frac{1}{x}\right) \quad (2.6)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{e^{-ixt}}{t} = i\pi \delta(x)$$

$$(k + \hat{k})\delta(k^2 - \hat{k}^2) = \delta(k - \hat{k}) + \delta(k + \hat{k}) = \delta(k - \hat{k})$$

Die letzte Identität gilt, wenn das Wellenpaket nur Impulse gleichen Vorzeichens enthält, d.h. die Impulsunschärfe δk klein gegen den mittleren Impuls ist. Im Grenzfall $t \rightarrow -\infty$ ergibt sich analog die Norm des Anfangswellenpakets.

$$N = \lim_{t \rightarrow -\infty} \int dx |\Psi(x, t)|^2 = \int dk |a(k)|^2 \quad (2.7)$$

Die Anteile der verschiedenen Impulskomponenten addieren sich inkohärent, sie werden unabhängig voneinander gestreut.

2.1.2 Dreidimensional

In drei Dimensionen lauten die stationären Streulösungen asymptotisch

$$\Psi_k(r) = e^{ikr} + f(\Omega) \frac{e^{ikr}}{r}$$

Der Wellenpaketwirkungsquerschnitt ist gegeben durch /36/

$$\begin{aligned} d\sigma_{WP} &= \lim_{t \rightarrow \infty} d\Omega \int dr r^2 |\Psi(r, t)|^2 \\ &= \frac{d\Omega}{(2\pi)^2} \int d^3k \int d^3k' a(k) a^*(k') f(k, \Omega) f^*(k', \Omega) \delta(k - k') \end{aligned} \quad (2.8)$$

dabei ist Ω die Beobachtungsrichtung und f die stationäre Streuamplitude. Ist das Potential sphärisch symmetrisch, so läßt sich der Ausdruck noch etwas vereinfachen.

$$d\sigma_{WP} = \frac{d\Omega}{(2\pi)^2} \int dk k^4 \left| \int d\Omega' a(k, \Omega') f(k, \Omega') \right|^2$$

Ω' ist der Winkel zwischen dem Impuls $\vec{k}$ und der Beobachtungsrichtung (Ω) .

Es ergeben sich im Prinzip Interferenzen zwischen Komponenten gleicher Energie, aber verschiedenen Einfallsrichtungen, d.h. mit Impulsen, die nicht parallel zum mittleren Impuls $\vec{k}_0$ des Wellenpakets sind. Nimmt man an, daß dieser mittlere Impuls groß gegen die Impulsunschärfe ist, kann man die Interferenzen vernachlässigen, die Richtungen der Impulse unterscheiden sich dann nur wenig.

2.1.3 Partialwellenentwicklung von Wellenpaketen

Dreidimensionale Streuung kann durch Partialwellenentwicklung auf (möglicherweise gekoppelte) eindimensionale Gleichungen abgebildet werden.

Das ist auch für Wellenpakete möglich. Es wird ein asymptotisch ($t \rightarrow \infty$) einfallendes Wellenpaket betrachtet, das senkrecht zur Einfallsrichtung konstant und somit unendlich ausgedehnt ist (wie eine ebene Welle) :

$$\Psi_{WP}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Psi(k) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (2.9)$$

wobei $\vec{k} = k\vec{k}_0$ ein Vektor in Bewegungsrichtung des Wellenpakets vom Betrag der Integrationsvariablen k ist. Ersetzt man die ebenen Wellen in (2.9) durch deren Partialwellenentwicklung /35/ so ergibt sich

$$\Psi_{in} = \sum_{\ell} (2\ell + 1) \int_{k>0} i^{\ell} j_{\ell}(kr) [\Psi(k) P_{\ell}(\cos\theta) + \Psi(-k) P_{\ell}(\cos(\pi - \theta))] dk \quad (2.10)$$

θ ist dabei der Winkel zwischen Einfalls- und Beobachtungsrichtung. Der zweite Term in der eckigen Klammer stellt die schon asymptotisch, d.h. vor der Reaktion, auslaufenden Anteile (mit $\vec{k} \cdot \vec{k}_0 < 0$) dar. Man kann ihn vernachlässigen, wenn die Impulsunschärfe klein ist gegen den mittleren Impuls, was im Experiment immer erfüllt ist. Ersetzt man in (2.10) die PW - Entwicklung der einfallenden ebenen Wellen durch die der asymptotischen stationären Streulösungen, so ergibt sich die asymptotische Zeitentwicklung unseres Wellenpakets zu :

$$\Psi(r, t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos\theta) \int \Psi(k) [i^{\ell} j_{\ell}(kr) + f_{\ell}(k) \frac{e^{ikr}}{r}] e^{i\omega(k)t} dk \quad (2.11)$$

$$= \frac{1}{2\pi} \sum_{\ell} (2\ell + 1) P_{\ell}(\cos\theta) \frac{i(-)^{\ell}}{2kr} \int \Psi(k) [e^{-ikr} + r_{\ell}(k) e^{ikr}] e^{i\omega(k)t} dk \quad (2.12)$$

Beim Übergang von (2.11) auf (2.12) wurde die asymptotische Entwicklung der Besselfunktionen verwendet /49/. Gleichung (2.12) ist so geschrieben, daß sie die Analogie zu den eindimensionalen Streuwellen

zeigt. Der Ausdruck in der eckigen Klammer ist die asymptotische Entwicklung der Lösung der eindimensionalen Partialwellen – Schrödingergleichung

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right] \psi = E \psi \quad (2.13)$$

Die Partialwellenstreuamplituden f_ℓ ergeben sich aus den 'Reflexionskoeffizienten' r_ℓ zu

$$f_\ell = \frac{i}{2k} \left[1 + (-)^{\ell} r_\ell \right] \quad (2.14)$$

Bei der Verwendung der Randbedingung einlaufender Wellen (IWBC) erweitert man den Raum auf die ganze reelle Achse und löst (2.13) (mit einem extrapolierten Potential – vergl. Kap. 4) auch für negative Radien. Man erhält asymptotisch die gleichen Lösungen wie im eindimensionalen Fall.

$$\varphi_{\ell,k}(r) = \Theta(r) [e^{-ikr} + r_\ell(k) e^{ikr}] + \Theta(-r) t_\ell(k) e^{-ikr} \quad (2.15)$$

Den transmittierten Teil für negative r in (2.15) muß man als eine in den Kern hineinlaufende Welle ansehen. Zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten kann man ihn genauso behandeln wie den reflektierten Teil. Die Winkelverteilung hat natürlich keine physikalische Bedeutung, man erhält nur totale Wirkungsquerschnitte, allerdings für jede Partialwelle individuell. Deren Verteilung (normiert auf den gesamten Wirkungsquerschnitt) stellt die Drehimpulsverteilung des Compoundkerns dar /20/.

Die gesamte Lösung der Partialwellen Gleichung ergibt sich damit asymptotisch zu

$$\Psi(r,t) = \sum_{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos\theta) \frac{i^{-\ell}}{2kr} \int dk \Psi(k) \varphi_{\ell,k}(r) e^{-i\omega(k)t} \quad (2.16)$$

Der gesamte Wirkungsquerschnitt ergibt sich wie in Kap. 2.1 als Summe aus Fusions – und Streuanteil.

$$\begin{aligned}
\sigma_{\ell} + \sigma_{\ell'} &= \lim_{t \rightarrow \infty} \int r^2 dr \int d\Omega |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \\
&= \lim_{t \rightarrow \infty} \int r^2 dr \int d\Omega \sum_{\ell, \ell'} (2\ell + 1)(2\ell' + 1) P_{\ell} P_{\ell'} (-)^{\ell + \ell'} \\
&\quad \cdot \int dk dk' \frac{1}{4kk'} \varphi_{k, \ell}(r) \varphi_{k', \ell'}^*(r) e^{-i(\omega - \omega')t} \quad (2.17) \\
&= \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) \int dk \frac{k_0^2}{k^2} |a(k)|^2 (|t_{k, \ell}|^2 + |r_{k, \ell}|^2) \\
&= \frac{\pi}{k_0^2} \sum_{\ell} (2\ell + 1) (T_{\ell}^{\text{WP}} + R_{\ell}^{\text{WP}})
\end{aligned}$$

Die Funktionen $\varphi_{\ell, k}(r)$ sind die Lösungen der eindimensionalen Partialwellengleichung mit der asymptotischen Entwicklung (2.15). Der Faktor k_0^2 wurde eingefügt, um die Analogie mit der Gleichung für den stationären Wirkungsquerschnitt Gl. (1.1) hervortreten zu lassen. Die Impulsverteilung erhält einen Korrekturfaktor k_0/k . Um für eine dreidimensionale Wellenfront mit der Impulsverteilung $a(k)$ den Wirkungsquerschnitt zu berechnen, muß man also die Partialwellen Gleichung (2.13) für eine Welle mit der Impulsverteilung $b(k) = k_0/k \cdot a(k)$ lösen. Der Zusammenhang zwischen stationärem Partialwellen - Wirkungsquerschnitt σ_{ℓ} und dem eines Wellenpakets mit Impulsverteilung $a(k)$ ergibt sich somit zu

$$\sigma_{\text{WP}, \ell} = \int dk |b(k)|^2 \sigma_{\ell}(k) \quad (2.18)$$

2.2 Zeitentwicklung

Die Zeitentwicklung einer Welle in einem n -dimensionalen Raum mit den Koordinaten $\vec{x} = \{x_j, j = 1..n\}$ wird durch die zeitabhängige Schrödingergleichung beschrieben.

$$H \Psi(\vec{x}, t) = i\hbar \frac{d}{dt} \Psi(\vec{x}, t) \quad (2.19)$$

mit einem Hamiltonoperator

$$H = - \sum_j \frac{\hbar^2}{2m_j} \frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(\vec{x}) \quad (2.20)$$

Wir faktorisieren die Zeitentwicklung bezüglich der verschiedenen Freiheitsgrade bzw. Koordinaten. Deshalb wird zuerst die Vorgehensweise in einer Dimension betrachtet.

2.2.1 Eindimensional

Das nachfolgend beschriebene Verfahren läßt sich auch bei ortsabhängigen Massen $m = m(x)$, sowie für gekoppelte Gleichungen /36/ der Form

$$\frac{\hbar^2}{2m_i(x)} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_i(x) + \sum_j V_{ij}(x) \Psi_j(x) = E \Psi_i(x)$$

verwenden. Dann ist $m_i(x)$ die (i.a. kanal- und ortsabhängige) (evtl. reduzierte) Masse, $\Psi_i(x)$ die Wellenfunktion im Kanal i und

$$V_{ij}(x) = [\epsilon_i + V(x)] \delta_{ij} + F_{ij}(x)$$

die Summe aus Anregungsenergie, Diagonalpotential und Kopplungsmatrix. Die Lösung von (2.19) findet man mittels des Zeitentwicklungsoperators

$$|\Psi(t)\rangle = U |\Psi(t_0)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\Psi(t_0)\rangle \quad (2.21)$$

Zur Auswertung diskretisiert man (2.21) in der Zeit mit der (klei-

nen) Schrittweite δ

$$|\Psi(t + \delta)\rangle = e^{-iH\delta/\hbar} |\Psi(t)\rangle \quad (2.22)$$

und entwickelt nach δ . Eine Taylorentwicklung der Exponentialfunktion, die auf eine einfache explizite Gleichung für $\Psi(t + \delta)$ führen würde, verbietet sich, da sie in keiner Ordnung unitär ist und somit die Normerhaltung verletzen würde, und da sich das daraus ergebende Verfahren numerisch instabil wäre /39/. Stattdessen wird die Cayleysche Näherung verwendet, die man auch als Prädiktor – Korrektor Verfahren auffassen kann

$$e^{-iH\delta/\hbar} \rightarrow \frac{1 - iH\delta/2\hbar}{1 + iH\delta/2\hbar} + O(\delta^3). \quad (2.23)$$

Gleichung (2.23) in (2.22) eingesetzt und ausmultipliziert ergibt

$$\left(1 + \frac{i}{2\hbar} H\delta\right) |\Psi(t + \delta)\rangle = \left(1 - \frac{i}{2\hbar} H\delta\right) |\Psi(t)\rangle.$$

Mit der Substitution $\chi = \frac{1}{2} [\Psi(t + \delta) + \Psi(t)]$ und der expliziten Form des Hamiltonoperators ergibt sich

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} V(x) + i \frac{4\mu}{\hbar\delta} \right] \chi(x, t) = i \frac{4\mu}{\hbar\delta} \Psi(x, t) \quad (2.24)$$

$$\Psi(x, t + \delta) = 2\chi(x, t) - \Psi(x, t)$$

Man erhält eine inhomogene 'Schrödingergleichung', in der das Potential um einen zusätzlichen konstanten Imaginärteil der Form $4i\mu/\hbar\delta$ ergänzt wird.

Die Lösung von (2.24) erfolgt durch Diskretisierung im Ortsraum und Approximation der Ableitung durch ein Differenzenverfahren. Während in Ref. /39/ das Dreipunktverfahren verwendet wurde, das einen Fehler 4. Ordnung in der Ortschaftweite ε hat, verwenden wir das Numerov – Verfahren, dessen Fehler 6. Ordnung in ε ist /59 und Anhang A/. Damit wird es möglich, auch in zwei Dimensionen bei vertretbarem

numerischem Aufwand (Speicherplatz) quantitativ brauchbare Ergebnisse zu erhalten. Die diskretisierten Gleichungen für jeden Zeitschritt lauten

$$\varphi_{j+1}\chi_{j+1} + (10\varphi_j - 12)\chi_j + \varphi_{j-1}\chi_{j-1} = i\gamma\Phi_j \quad (2.25)$$

$$\Psi_j(t + \delta) = 2\chi_j - \Psi_j(t)$$

$$\text{mit } \gamma = \frac{m\varepsilon^2}{3\hbar\delta}, \quad \varphi_j = 1 + i\gamma - \frac{\delta\gamma}{4\hbar} V_j \quad \text{und} \quad \Phi_j(t) = \Psi_{j+1}(t) + 10\Psi_j(t) + \Psi_{j-1}(t).$$

Gleichung (2.25) stellt ein tridiagonales Gleichungssystem für χ dar. Wir lösen es durch Gaußelimination, die auf folgende Rekursion führt

$$e_j = (10\varphi_j - 12 - \varphi_{j-1}e_{j-1})^{-1}\varphi_{j+1} \quad j = 1..N \quad (2.26)$$

$$f_j = (10\varphi_j - 12 - \varphi_{j-1}e_{j-1})^{-1}(\Phi_j - \varphi_{j-1}f_{j-1}) \quad j = 1..N$$

$$\chi_{j-1} = f_j - e_j\chi_j \quad j = N..1$$

$$\Psi_j(t + \delta) = 2\chi_j - \Psi_j(t) \quad j = N..1$$

Die Gleichungen (2.26) sind so geschrieben, daß sie auch als gekoppelte Gleichungen richtig sind. Dann sind e und φ Matritzen und f, Φ, χ, Ψ Vektoren.

2.2.2 Zweidimensional

Für die Zeitentwicklung in zwei Dimensionen schreiben wir den Hamiltonoperator in der Form

$$H_{x,y} = T_x + T_y + V(x) + V(y) + W(x,y) \quad (2.27)$$

wobei $T_{x/y}$ die kinetische Energie des jeweiligen Freiheitsgrads ist. Man kann den Zeitentwicklungsoperator näherungsweise in 'Koordinaten - Zeitentwicklungsoperatoren' faktorisieren /41/

$$\begin{aligned} e^{-iH_{x,y}\delta/\hbar} &= e^{-iH_x\delta/\hbar} e^{-iH_y\delta/\hbar} \left\{ 1 + \frac{\delta^2}{2\hbar^2} [T_x - T_y, W]_- \right\} + O(\delta^3) \\ &= U_x U_y \left\{ 1 + \frac{\delta^2}{2\hbar^2} [T_x - T_y, W]_- \right\} + O(\delta^3) \end{aligned} \quad (2.28)$$

Dabei ist $H_{x/y} = T_{x/y} + V(x/y) + W(x,y)/2$. Vernachlässigt man die Korrektur der Ordnung δ^2 , dann entkoppeln die Zeitentwicklungen der beiden Koordinaten. Man kann zuerst den eindimensionalen Zeitentwicklungsoperator U_y wie in Kap. 2.1 beschrieben auf die Wellenfunktion für alle als Parameter festgehaltenen x - Werte anwenden. Es ergibt sich eine Zwischenfunktion $|\Psi'\rangle$, auf die entsprechend U_x angewendet wird.

$$\begin{aligned} |\Psi'\rangle &= U_y(y;x) |\Psi(t)\rangle & x = x_0 \dots x_N \\ |\Psi(t+\delta)\rangle &= U_x(x;y) |\Psi'\rangle & y = y_0 \dots y_M \end{aligned} \quad (2.29)$$

Praktisch bedeutet das, daß für jede Zeile bzw. Spalte des als Matrix in den Koordinaten dargestellten Wellenfeldes Ψ_{ij} ein lineares Gleichungssystem der Form (2.25) gelöst werden muß. Insbesondere muß während der Rechnung immer nur eine Zeile oder Spalte der Matrix Ψ_{ij} zusammen mit den Zwischenergebnissen des Eliminationsverfahrens zwischengespeichert werden.

Die Näherung des Zeitentwicklungsoperators durch das Produkt aus

den Koordinaten – Zeitentwicklungsoperatoren ist im Gegensatz zum ein-dimensionalen Fall nur noch in 1. Ordnung im Zeitschritt δ richtig. Diesen Fehler kann man eliminieren, wenn man den Korrekturoperator in Gl. (2.28) mitverwendet. Dieser hat allerdings den Nachteil, daß erste Ableitungen von Potential und Wellenfunktion enthält bzw. erzeugt, die numerisch schlecht handhabbar sind (um die gleiche Fehlerordnung bezüglich des Ortsschritts wie beim Numerov Algorithmus zu erreichen, müßte man ein 7 Punkt Verfahren benutzen und damit statt eines tridiagonalen Gleichungssystem eines mit 7 Diagonalreihen lösen). Einen anderen Ausweg zeigt Gl. (2.28). Verwendet man den halben Antikommutator der Koordinaten – Zeitentwicklungsoperatoren

$$e^{-iH\delta/\hbar} = \frac{1}{2}(U_x U_y + U_y U_x) + O(\delta^3) \quad (2.30)$$

hebt sich der Fehler in δ^2 weg, womit die Größenordnung des Gesamtfehlers wieder dieselbe wie in einer Dimension wird.

Numerisch hat Gleichung (2.30) allerdings den Nachteil, daß nun zwei Zwischenwellenfunktionen

$$|\psi_x\rangle = U_x |\psi(t)\rangle \quad \text{und} \quad |\psi_y\rangle = U_y |\psi(t)\rangle$$

auftreten, die beide für die nachfolgende 2. Zeitentwicklung gespeichert werden müssen. Das bedeutet im Vergleich zum Verfahren (2.25) etwa den doppelten Speicherplatzbedarf. Da auf den Maschinen unseres Rechenzentrums dafür nicht genügend Zentralspeicherplatz zur Verfügung stand, wurde der Algorithmus (2.30) nur für Kontrollrechnungen auf der CRAY – Anlage des Max Planck Instituts für Plasmaphysik verwendet.

2.3 Fehlerabschätzung

Das Shannonsche Abtasttheorem [62] besagt, daß eine Funktion der Frequenz f exakt – d.h. ohne Informationsverlust – durch eine Folge diskreter Werte wiedergegeben wird, wenn die Abtastpunkte weniger als die halbe Periodendauer voneinander entfernt sind. Daraus ergibt sich folgende Beziehung zwischen Ortschaftweite ϵ bzw. Zeitintervall δ und maximal darstellbarem Impuls bzw. Frequenz.

$$\delta \omega_{\max} \leq \pi \quad (2.31)$$

$$k_{\max} \epsilon \leq \pi \quad (2.32)$$

Diese Beziehungen lassen sich am einfachsten verstehen, wenn man eine diskrete Fouriertransformation der Wellenfunktion (hier als Beispiel bezüglich der Ortsabhängigkeit) durchführt.

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=-M}^M \varphi_m e^{2\pi i n m / N}$$

$$\varphi_m = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^N \psi_n e^{-2\pi i n m / N}$$

wobei $\psi_n = \psi(x_0 + n\epsilon)$ der Funktionswert am n -ten Stützpunkt, und $N = 2M + 1$ die Zahl der Stützpunkte ist. Die physikalische Wellenzahl ist $k_m = 2\pi m / \epsilon$ mit $m = -M..M$. Komponenten mit höheren Impulsen k_m als dem maximalen $k_{\max} = k_M$ ergeben an den Stützpunkten dieselben Funktionswerte wie die Komponente zum Index $m - M$ (d.h. sie fallen schon in die 2. Brillouin Zone). Man kann die Diskretisierung in Raum und Zeit daher als Fourierentwicklung nach ebenen Wellen auffassen, bei der alle Komponententen bis zu maximalen Impuls $k_{\max}$ (bzw. zur maximalen Frequenz $\omega_{\max}$) exakt enthalten sind.

Dagegen sind die aus den diskretisierten Funktionen numerisch berechneten Ableitungen nur noch näherungsweise richtig.

Die Fehler, die durch die numerische Approximation des Zeitent-

wicklungsoperators und der darin enthaltenen Ableitung entstehen, lassen sich folgendermaßen abschätzen :

2.3.1 Zeitentwicklung

Läßt man den Fehler der Ortsableitung außer Betracht, so ergibt sich als Näherung für die Zeitentwicklung eines Eigenzustands zur Energie $\hbar\omega$:

$$|\varphi(t+\delta)\rangle = \frac{1 - i\delta\omega/2}{1 + i\delta\omega/2} |\varphi(t)\rangle = e^{-2i \arctan(\delta\omega/2)} |\varphi(t)\rangle \quad (2.33)$$

wogegen der exakte Ausdruck lautet :

$$|\varphi(t+\delta)\rangle = e^{-i\delta\omega} |\varphi(t)\rangle$$

Statt der exakten Phasenänderung $\delta\omega$ führt jeder Zeitschritt in der Cayleynäherung zu einer Phasenänderung

$$\varphi_c = \delta\omega \left[\frac{2 \arctan \delta\omega/2}{\delta\omega} \right] = \delta\omega \left[\frac{2}{\delta\omega_0} \arctan \frac{\delta\omega_0}{2} + \delta\Delta\omega g(\delta\omega_0/2) + O(\delta^2\omega_0^2) \right], \quad (2.34)$$

mit $\omega = \omega_0 + \Delta\omega$, wobei $\Delta\omega$ von der Größenordnung der Energieunschärfe des Wellenpakets ist. Die Funktion g ist die Ableitung des ersten, von $\delta\omega_0$ abhängigen Terms. Dieser erste Term ergibt eine nichtlineare Skalierung des Zeitschritts

$$\delta \rightarrow \frac{2}{\omega_0} \arctan \frac{\delta\omega_0}{2} \approx \delta \left[1 - \frac{1}{12} \delta^2 \omega_0^2 + O(\delta^4 \omega_0^4) \right],$$

der zu einer Verminderung der Gruppengeschwindigkeit führt.

$$v_g^{\text{eff}} = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{\omega_0} = \frac{d}{dk} \frac{2}{\delta} \arctan \frac{\delta\omega_0}{2} = \frac{1}{1 + \delta^2 \omega_0^2 / 4} v_g^{\text{exakt}}$$

In den Rechnungen macht sich das durch eine Zunahme der Laufzeit der Welle und auf Grund der Nichtlinearität der Zeitskalierung durch eine Erhöhung der notwendigen Zahl der Zeitschritte bemerkbar. Diese steigt auch für kleine Werte von δ (wenn v_g konstant wird). Dazwi-

schen ergibt sich ein Minimum.

Diese Zeitskalierung bewirkt fast keine Änderung der Transmissionswahrscheinlichkeit. Auf Grund numerischer Effekte (Rundungsfehler) wird die größte Genauigkeit bei der minimalen Zahl von Zeitschritten erreicht. Größere Fehler treten erst auf, wenn der zweite, energieabhängige Term in Gl. (2.34) wichtig wird. Abb. 4 zeigt die relative Laufzeit des Wellenpakets und die Anzahl der Zeitschritte relativ zum minimalen Wert in Abhängigkeit von $\delta\Delta\omega$

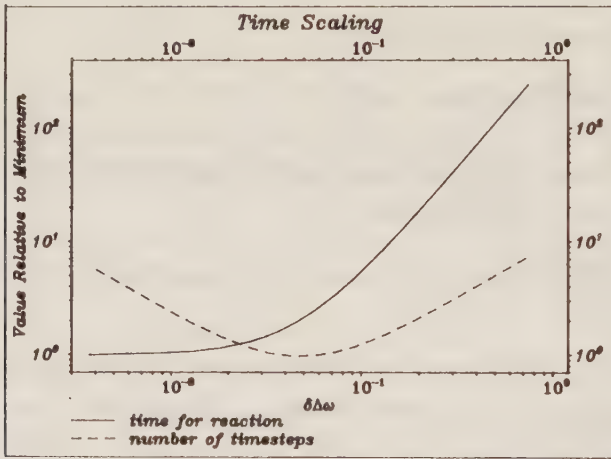


Abb. 4. Zeitskalierung bei der diskreten Zeitentwicklung von Wellenpaketen aufgetragen gegen das Produkt aus dem Zeitschritt und der Frequenz – (also im wesentlichen Energie –) unschärfe des Wellenpakets. Die durchgezogene Linie stellt die Gesamtzeit, die bei Verwendung des Wellenpaketalgorithmus benötigt wird, relativ zur physikalisch benötigten Zeit für die Reaktion dar, die gestrichelte die benötigte Zahl von Zeitschritten. Die Werte sind jeweils relativ zum Minimum angegeben.

Die Änderung der Zeitskala, die die Größe des Zeitschritts limitiert, läßt sich im eindimensionalen Fall beseitigen, wenn man den Energienullpunkt auf die mittlere Energie des Wellenpakets legt. Der Zeit-

entwicklungsoperator läßt sich umformen zu

$$e^{-iH\delta/\hbar} = e^{-iE_0\delta/\hbar} e^{-i(H-E_0\delta)/\hbar}$$

Der abgespaltene Phasenfaktor ist konstant und hat keine physikalische Bedeutung. In den obigen Gleichungen kann man dann ω_0 durch 0 ersetzen. Das bedeutet im Besonderen, daß die Gruppengeschwindigkeit sich nicht ändert.

Die maximal auftretende Frequenz ist nur noch durch die Energieunschärfe des Wellenpakets bestimmt, sie ist ein kleines Vielfaches davon.

$$\hbar\omega_{\max} = n\Delta E$$

Der relative Phasenfehler der Zeitentwicklung ergibt sich zu

$$\frac{\Delta\varphi}{\varphi} = \frac{2}{\delta\Delta\omega} \arctan \frac{\delta\Delta\omega}{2} = \frac{1}{12} \delta^2\Delta\omega^2 + O(\delta^4\Delta\omega^4) \quad (2.35)$$

Als Bedingung für die Größe des Zeitschritts erhält man mit $\omega = \Delta\omega = \hbar\Delta E$ und einer Gesamtlaufzeit $T = N\delta$

$$N\delta^2\Delta\omega^2/12 = T\delta\Delta\omega^2/12 = T\delta\Delta E^2/\hbar^2 \ll 1 \quad (2.36)$$

Bedingung (2.31) ist damit automatisch erfüllt.

Auf Grund des starken Anstiegs der Fusionsanregungsfunktionen mit der Energie können Wellenpaketkomponenten hoher Energie, auch wenn ihre Amplitude nur sehr gering ist, einen großen Beitrag zur Transmission liefern. Die Bedingung (2.36) muß daher großzügig erfüllt werden, d.h. für ein hinreichend großes Vielfaches der Energieunschärfe. Abb. 5 zeigt den relativen Fehler der Transmission in Abhängigkeit von $\delta\Delta\omega$. Beim Vergleich von Abb. 4 und Abb. 5 ist die unterschiedliche Skalierung der $\delta\Delta\omega$ -Achse zu beachten. Wie Abb. 5 zeigt sind mit Energieverschiebung wesentlich größere Zeitschritte möglich als ohne.

In zwei Dimensionen sind auf Grund der Kopplung zwischen den Freiheitsgraden die Energieerwartungswerte E_x bzw. E_y der Wellen, auf die die Koordinaten-Zeitentwicklungsoperatoren angewendet werden,

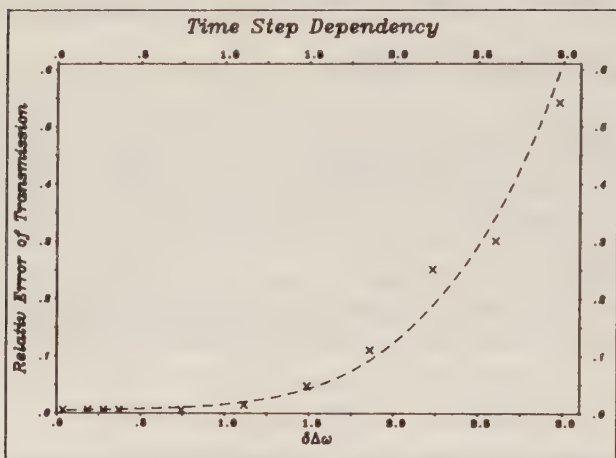


Abb. 5. Relativer Fehler für die Transmission des Wellenpakets als Funktion des Zeitschritts. Die Streuung der Punkte um eine glatten Kurve entsteht durch die grobe Auflösung bei großen Zeitschritten. (Die Zeitentwicklung kann nur nach einem ganzen, d.h. vollständigem Schritt beendet werden).

eine Funktion der jeweils anderen Koordinate und der Zeit.

$$E_x = E_x(y, t) = \langle \Psi(x; y) | H_x | \Psi(x; y) \rangle \quad (2.37)$$

$$E_y = E_y(x, t) = \langle \Psi(y; x) | H_y | \Psi(y; x) \rangle$$

Man kann daher den Energienullpunkt nicht global festlegen, um für jede Zeitentwicklung deren zugehörige Gesamtenergie zu Null zu machen. Exakt wäre folgendermaßen vorzugehen : Für jeden eindimensionalen Zeitschritt in x bzw. y Richtung wird nach Gleichung (2.37) E_x bzw. E_y bestimmt und der Energienullpunkt um diesen Wert verschoben.

$$U_{x/y} \rightarrow e^{-i(H_{x/y} - E_{x/y})\delta/\hbar} e^{-iE_{x/y}\delta/\hbar}$$

Die Wellenfunktion wird dabei mit einem von der anderen Koordinate

abhängigen Phasenfaktor $e^{iE_{x/y}d/\hbar}$ multipliziert, um den wieder korrigiert werden muß.

Eine Berechnung der Energieerwartungswerte ist jedoch numerisch aufwendig. Für Fusionsreaktionen läßt sich die Energieverschiebung auch ohne Berechnung von Erwartungswerten auf Grund folgender Abschätzungen approximativ durchführen : Die Energie der Radialbewegung ist etwa gleich der Höhe der Barriere, die des zweiten Freiheitsgrads ist (ohne Kopplung) die Grundzustandsenergie tiefliegender Anregungen. Eine obere Grenze für die Energie, die der Kopplung entspricht, läßt sich aus der Barrierenverschiebung (d.h. der Differenz zwischem ein-dimensionaler Barriere und Sattelpunkt) abschätzen. Beide den zweiten Freiheitsgrad betreffenden Werte sind klein gegen die Höhe der Barriere und damit der Relativenergie. Deshalb wird nur für die Radialbewegung eine konstante Verschiebung um die asymptotische kinetische Energie vorgenommen. Im zweiten Freiheitsgrad könnte man um die mittlere Energie niedrig liegender Zustände verschieben, um deren Anregung zu berücksichtigen; beispielsweise könnte man für einen harmonischen Oszillator $E_y = n/2 \cdot \hbar\omega$ setzen, wenn Anregungen bis zum n -ten Niveau auftreten.

Eine Voraussetzung für diese Vorgehensweise ist allerdings, daß das Gesamtpotential in Diagonaleile und einen im Vergleich dazu kleinen Kopplungsterm separiert :

$$V(x,y) = V(x) + V(y) + W(x,y) \quad \text{mit } W(x,y) \ll \max_{x/y} (V_x, V_y)$$

Ist das nicht der Fall, wie zum Beispiel bei Doppelfaltungspotentialen, verwenden wir folgende Zerlegung :

$$V(x,y) = V(x,0) + V(x \rightarrow \infty, y) + [V(x,y) - V(x,0) - V(x \rightarrow \infty, y)] \quad (2.38)$$

Dabei wird angenommen, daß $y = 0$ dem (i.a. sphärischen) Grundzustand der freien Kerne für den Freiheitsgrad y entspricht und daß das Radialpotential für große Abstände verschwindet, so daß $V(x \rightarrow \infty, y)$ das inneren Potential der freien Kerne $V(y)$ darstellt, wenn x den Schwer-

punktsabstand bedeutet.

2.3.2 Ortsableitungen

Der Fehler der Approximation der zweiten Ableitungen läßt sich abschätzen für ebene Wellen, die Lösung von (2.24) für feste Energie und ein lokal als konstant angenommenes Potential sind. Die (triviale) Zeitabhängigkeit wird weggelassen.

$$\chi_j = \psi_j(t + d) + \psi_j(t) = e^{ikr_j} \quad (2.39)$$

mit

$$\chi_{j\pm 1} = e^{\pm ik\epsilon} \chi_j$$

$$\psi_{j\pm 1} = e^{\pm ik\epsilon} \psi_j$$

Dabei ist $k = \sqrt{2\mu(E - V_j)}/\hbar$ die lokale Wellenzahl. Gleichung (2.39) in (2.25) eingesetzt ergibt :

$$\left\{ \varphi_j [2\cos(k\epsilon) + 10] - 12 \right\} \chi_j = 2i\gamma [2\cos(k\epsilon) + 10] \psi_j$$

oder

$$\left[\frac{12}{\epsilon^2} \left(1 - \frac{12}{2\cos(k\epsilon) + 10} \right) - \frac{2\mu}{\hbar^2} V_j + i \frac{4\mu}{\hbar d} \right] \chi_j = i \frac{4\mu}{\hbar d} \psi_j$$

Der Vergleich mit der bezüglich der Ortsableitung exakten Gleichung,

$$\left[-k^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu} V(r) + i \frac{4\mu}{\hbar d} \right] \chi = i \frac{4\mu}{\hbar d} \psi(r,t) \quad (2.40)$$

die man durch Einsetzen von Gl. (2.39) in Gl. (2.24) erhält, ergibt, daß der Faktor k^2 aus der 2. Ableitung durch

$$\frac{12}{\epsilon^2} \left(\frac{12}{2\cos(k\epsilon) + 10} - 1 \right) = k^2 \left[1 - \frac{k^4 \epsilon^4}{720} + O(k^6 \epsilon^6) \right]$$

approximiert wird. Hieraus fließt die Forderung, daß

$$\frac{k_{\max}^4 \epsilon^4}{720} \ll 1 \quad (2.41)$$

Damit muß die Schrittweite zum Erreichen einer hinreichend genauen Ableitung etwa genauso groß gewählt werden ($k_{\max} \epsilon \ll 5$), wie sie sich auch aus der Bedingung (2.32) für die maximal mögliche Auflösung ergibt.

Abb. 6 zeigt den relativen Fehler $\Delta T/T$ der Transmission und den relativen Energieverlust in Abhängigkeit von $k\epsilon$.

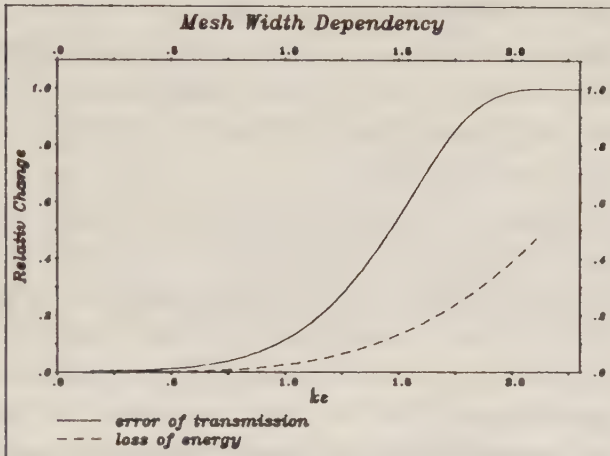


Abb. 6. Relativer Fehler der Transmission und relativer Energieverlust des Wellenpakets als Funktion der Ortsschrittweite.

2.4 Randbedingungen

Mathematisch gesehen stellt die Zeitentwicklung eines Wellenpakets ein Anfangswertproblem dar.

Da das Wellenpaket nur für einen endlichen Ortsbereich gespeichert werden kann, schließen wir es in einen Kasten ein. Auf dessen Rand müssen wir dann die Anschlußbedingungen spezifizieren. Für jeden Zeitschritt ist also ein Randwertproblem zu lösen.

Bezeichnet man mit den Indizes 0 und J die Ränder des Kastens (in einer Dimension), so ergeben sich die Randbedingungen aus Gl. (2.25) (vergl. Anhang A), wenn außen die Werte Ψ_{-1} und Ψ_{J+1} für den Zeitpunkt $t + \delta$ vorgegeben sind als

$$e_0 = \varphi_1 / (10 \varphi_0 - 12) \quad (2.42)$$

$$f_0 = \{ i \gamma [\Psi_{-1}(t) + 10 \Psi_0(t) + \Psi_1(t) - \varphi_{-1} \chi_{-1}] / (10 \varphi_0 - 12) \}$$

bzw.

$$e_{-1} = 0 \quad \text{und} \quad f_{-1} = \chi_{-1} \quad (2.43)$$

$$\chi_J = f_{J+1} - e_J \chi_J = f_J - \frac{1}{2} e_J [\Psi_{J+1}(t) + \Psi_{J+1}(t + \delta)].$$

Der Wellenpaketalgorithmus erweist sich als sehr flexibel. Durch Festlegung verschiedener Randbedingungen können unterschiedliche Probleme behandelt werden, von denen einige in den folgenden Abschnitten diskutiert werden sollen.

Die Randbedingung für das Feld e ist von der Wellenfunktion unabhängig und ändert sich nicht bei den nachfolgenden Varianten.

2.4.1 Lokalisierte Wellenpakete

Die naheliegendste Wahl der Randbedingungen ist die, den Kasten so groß zu machen, daß die Welle dessen Rand im Laufe ihrer Ausbreitung nicht erreicht. Man kann die Wellenfunktion dann am Kastenrand identisch Null setzen /39/. Die in Gleichung (2.42/43) allgemein formulierten Randbedingungen lauten für diesen Fall

$$\Psi_{-1} = \Psi_{J+1} = 0 \quad \forall t$$

bzw. (2.44)

$$f_{-1} = 0 \quad \text{und} \quad \chi_J = f_J$$

wobei die Indizes $j=0$ bzw. $j=J$ wieder den Koordinaten des Kastenrands entsprechen sollen. Physikalisch bedeutet das, eine unendlich hohe Potentialstufe am Rand einzuführen. Diese reflektiert eine auftreffende Welle vollständig. Dieser Umstand erlaubt es, den Anwendungsbereich der Randbedingungen (2.44) zu erweitern. Bei Fusionsreaktionen wird je ein Teil des Wellenpakets durch die Barriere transmittiert bzw. von ihr reflektiert. Anstatt den Kasten so groß zu machen, daß sich die beiden Teilpakete bis zum Abschluß der Reaktion (d.h. bis sie sich vollständig aus dem Bereich der Barriere entfernt haben) frei auseinanderbewegen, kann man sie am Kastenrand reflektieren und wieder bis (fast) an die Barriere zurücklaufen lassen. Die Normen der beiden Teilpakete und damit die Transmission und Reflektion ändern sich dabei nicht mehr. Man kann so aber fast die Hälfte des sonst benötigten Speicherplatzes einsparen. Abb. 7 zeigt diesen Ablauf an einem eindimensionalen Beispiel.

Aufgetragen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Wellenpakets als Funktion des Ortes (horizontal) und der Zeit (von hinten nach vorne). Das Maximum der Barriere ist als Linie angedeutet. Die Welle läuft von grossen Radien her kommend gegen die Barriere. Dort spaltet sie unter heftigen Interferenzen in einen durchlaufenden und einen

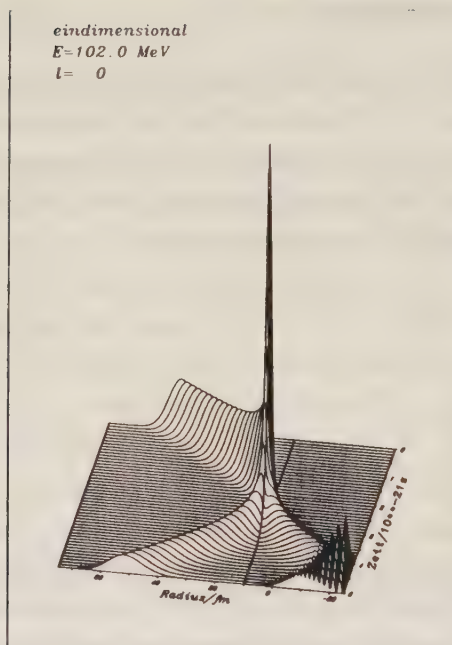


Abb. 7. Ablauf einer Fusionsreaktion für ein eindimensionales Wellenpaket. Aufgetragen ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit $|\psi|^2$ des Wellenpakets als Funktion des Orts und der Zeit. Das Wellenpaket läuft von links hinten (frühe Zeit und großer Abstand) auf die durch die durchgezogene Linie dargestellte Barriere zu. Dort spaltet es auf in einen nach rechts (in das Gebiet, das dem Compoundkern entspricht) laufenden Fusionsteil und einen reflektierten Teil.

reflektierten Teil auf. Beide Teile entfernen sich in entgegengesetzter Richtung von der Barriere und laufen schließlich gegen die Kastenränder, wo sie reflektiert werden. Zum Schluß beginnt die transmittierte Welle wieder in die Barriere einzudringen, ihre Norm würde sich vermindern, und die Rechnung ist zu beenden.

Bei eindimensionalen Rechnungen kann man den Kasten problemlos so groß zu machen, daß er gleichzeitig den Ort des Anfangswellenpakets und einen hinreichend großen Bereich um die Barriere herum einschließt, so daß die Welle den Kastenrand nicht erreicht. Dieses ist in

zwei Dimensionen nicht mehr möglich. Deshalb verwenden wir einen beweglichen Kasten, der mit dem Wellenpaket 'mitgeführt' wird. Das Mitbewegen des Kastens wird so durchgeführt, daß im Abstand einiger Zeitschritte der Ortserwartungswert des Wellenpakets

$$\langle \vec{r}(t) \rangle = \langle \Psi(\vec{r}, t) | \vec{r} | \Psi(\vec{r}, t) \rangle$$

berechnet wird und der Kasten dann so verschoben wird, daß es sich wieder im Zentrum des Kastens befindet. Praktisch bedeutet das, daß man das Wellenpaket innerhalb der Matrix, in der es abgespeichert ist, verschiebt und die Koordinaten des Kastens anpaßt. Dabei geht auf der einen Seite ein Teil der Welle verloren, auf der anderen wird sie im frei werdenden Bereich des Kastens auf Null gesetzt. Nach dem Auftreffen auf die Barriere wird der Kasten festgehalten.

Die Randbedingung, daß die Welle am Kastenrand verschwindet, sorgt dafür, daß die Verluste gering bleiben. Der Kasten ist daher so groß zu wählen, daß das einlaufende Wellenpaket in der Nähe des Randes hinreichend klein bleibt. Bei unseren zweidimensionalen Rechnungen liegt der Verlust der Norm bei etwa 10^{-7} , ist also sehr groß gegen den Fehler der Unitarität der Zeitentwicklung (ca. 10^{-12}), den man aus eindimensionalen Rechnungen mit festem Kasten erhält. Trotzdem ist er immer noch vernachlässigbar.

Die zusätzlichen Freiheitsgrade bei Fusionsreaktionen sind gebundene und damit lokalisierte Zustände. Bei solchen ist die Welle bereits durch das Potential auf einen bestimmten Raumbereich eingeschränkt, die Randbedingungen (2.44) werden also automatisch erfüllt.

2.4.2 Wellenzüge

In realen Experimenten ist die relative Energieunschärfe eines einzelnen Teilchens sehr klein, und damit sind die auftretenden Wellenpakete sehr groß gegenüber dem Streuzentrum. Bei den Rechnungen mußten wir uns auf im Vergleich dazu relativ kurze Wellenpakete beschränken. Die geringe Ausdehnung in Bewegungsrichtung und die damit verbundene Energieunschärfe läßt sich durch Faltung des Wirkungsquerschnitts mit der Impulsverteilung (siehe Kap 2.1) berücksichtigen und stellt auch für die Anschauung keine Schwierigkeit dar. Die Bewegung in der Ortskoordinate senkrecht zur Ausbreitungsrichtung, und damit die Winkelabhängigkeit der Reaktion, wird in dieser Arbeit durch Partialwellenentwicklung behandelt. Wir können jedoch (als Zwischenbemerkung) den entwickelten Formalismus für die Propagation von Wellenpaketen in zwei Dimensionen auch auf die Winkelabhängigkeit der Streuung anwenden. Dies geschieht durch die Behandlung von 'Wellenzügen', die ein sehr anschauliches Bild der Winkelabhängigkeit der Streuung liefern. Darunter sollen hier Wellenpakete in zwei Ortskoordinaten verstanden werden, die in der Richtung y , die senkrecht zu ihrer Ausbreitungsrichtung x ist, unendlich ausgedehnt und konstant sind :

$$\Psi(x,y) = \Psi(x)$$

Es treten also nur Impulse in x - Richtung auf. Nimmt man an, daß das Potential am Kastenrand verschwindet, so bewegt sich die einlaufende Welle parallel zum Rand $y = y_{\min}$ und $y = y_{\max}$. Als Randbedingung für die Zeitentwicklung in Richtung y erhält man, daß die Welle am Kastenrand konstant ist.

$$\Psi_{-1} = \Psi_0 \quad (2.45)$$

$$\Psi_{J+1} = \Psi_J$$

oder unter Verwendung von $V_{-1} = 0$ bzw. $\varphi_0 = 1 + iy$ in Gleichung

(2.42) eingesetzt

$$f_0 = [i\gamma(10\Psi_0 + \Psi_1) - \Psi_0] / (10\rho_0 - 12)$$

und am anderen Rand

$$\chi_J = \Psi_J$$

Für die Bewegung in Ausbreitungsrichtung werden die Randbedingungen des vorigen Kapitels (lokalisiertes Wellenpaket) benutzt.

Abb. 8 zeigt die Streuung eines zweidimensionalen Wellenzugs an einem repulsiven Potentialwall, der sich als Differenz zweier Woods - Saxon Potentiale gleicher Stärke aber unterschiedlicher Reichweite ergibt. Der Wall hat einen Radius von etwa 5 fm, eine Höhe von 18 MeV und eine Dicke von 1 fm, er stellt eine (sehr grobe) Näherung an den Coulombwall eines realistischen Kernpotentials dar. Im 4. Bild ist die reine Streuwelle dargestellt. Sie ist definiert als Differenz zwischen der gesamten Streulösung und dem durchlaufenden freien Wellenzug (d.h. mit verschwindendem Potential) : $|\Psi(V) - \Psi(V \equiv 0)|^2$. Es ergibt sich eine modulierte 'Kugelwelle', wie sie in der stationären Streutheorie auftritt.

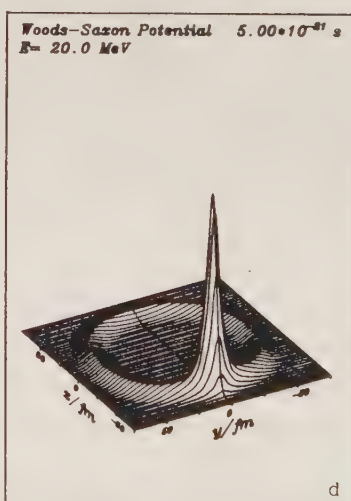
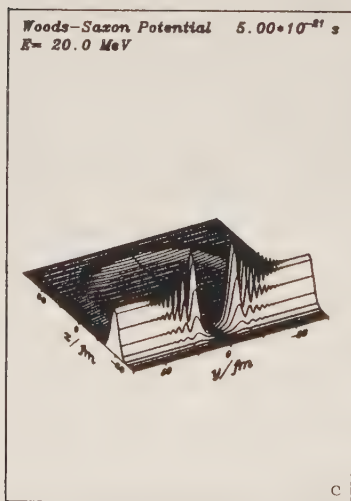
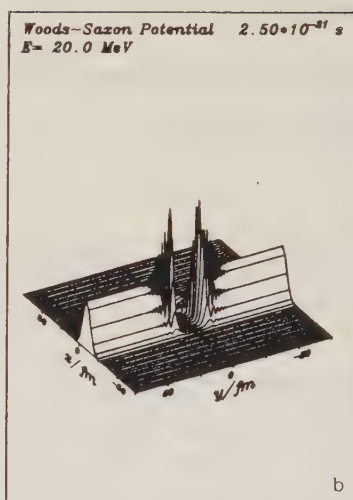


Abb. 8. Streuung eines zweidimensionalen Wellenzugs an einem Potentialtopf. Abb. 8 a)–d) zeigen Momentaufnahmen der gesamten Streuwelle vor, während und nach dem Stoß. In d) ist nur der auslaufende, gestreute Anteil dargestellt. Er ist das Wellenpaketäquivalent der auslaufenden Kugelwelle in der stationären Streutheorie. Die Spitze in Vorwärtsrichtung ist der Anteil der Streuwelle, der durch destruktive Interferenz mit der durchlaufenden Welle für die Erhaltung der Norm sorgt (entsprechend dem optischen Theorem).

2.4.3 Absorbierende Randbedingungen

Da die Reflexion an den Kastenrändern Probleme aufwerfen kann, wurden in Ref. /36/ absorbierende Randbedingungen untersucht. Es wurde Absorption entweder durch ein imaginäres Potential oder durch möglichst reflexionsfreies Abschneiden der an den Rand laufenden Teile der Welle betrachtet.

Das Abschneiden geschieht durch (stetiges und stetig differenzierbares) Anpassen einer Funktion $P(r)$ an die Welle in einem Abstand d vom Rand, der bei r_0 liege, wobei die Funktion P so zu wählen ist, daß sie bis zum Rand (praktisch) auf Null abfällt.

$$P(r_0 + d) = \Psi(r_0 + d)$$

$$P'(r_0 + d) = \Psi'(r_0 + d)$$

$$P(r_0) \approx 0$$

Nach jeweils so vielen Zeitschritten, wie die Welle benötigt, um vom Abstand d zum Rand und wieder zurück zulaufen, wird das Abschneiden wiederholt, so daß die reflektierten Anteile eliminiert werden.

Es zeigt sich jedoch, daß man bei vertretbarem Aufwand an Speicherplatz (Größe von d) keine befriedigende Unterdrückung der Reflexion erreicht. Das rührt daher, daß auch ein imaginäres Potential bzw. die Unstetigkeit der höhern Ableitungen der Welle an der Anpaßstelle Reflektionen verursacht.

2.4.4 Stationäre Lösungen

Die ideale Lösung des Reflektionsproblems wäre es, das Wellenpaket quasi durch den Kastenrand hindurch laufen zu lassen. Wegen der komplizierten Form und Zeitabhängigkeit gestreuter Wellenpakete ist das nicht möglich. Dagegen ist die asymptotische Form und die Zeitabhängigkeit von stationären Lösungen analytisch bekannt. Damit läßt sich die Zeitentwicklung einer stationären Welle in einem endlichen Raumbereich mit dem Wellenpaketalgorithmus beschreiben, indem man die bekannten Randbedingungen (einlaufende und reflektierte bzw. transmittierte ebene bzw. Coulomb - Wellen) verwendet. Umgekehrt kann man auf diese Weise stationäre Lösungen iterativ erzeugen.

In Ref. /63/ wurden gebundene Wellenfunktionen mittels einer Weiterentwicklung des Verfahrens des 'imaginären' Zeitschritts (imaginary time step) berechnet. Dabei wird folgende Gleichung iteriert :

$$|\Psi_{n+1}\rangle = e^{-(H-E)d^2/\hbar^2} |\Psi_n\rangle \quad (2.46)$$

Durch die Exponentialfunktion werden Komponenten, deren Energie sich vom vorgegebenen Wert E unterscheidet, herausgedämpft. Es verbleibt die Lösung, deren Energie am nächsten bei E liegt.

Wir betrachten die Zeitentwicklung einer beliebige Anfangswellenfunktion für einen Hamiltonoperator H. Nach einigen (reellen) Zeitschritten wird die Welle im Abstand d von den Rändern $r_{<}/> = r_{\min/\max} \pm d$ an Randbedingungen (für konstantes Potential) angepaßt.

$$\Psi(r \leq r_{<}) \rightarrow \Psi(r \leq r_{<}) = a e^{-ik_{<}r} \quad (2.47)$$

und

$$\Psi(r \geq r_{>}) \rightarrow \Psi(r \geq r_{>}) = b e^{-ik_{>}r} + c e^{ik_{>}r}$$

Die Parameter a, $k_{<}$, b, c ergeben sich aus den Anschlußbedingungen, d.h. stetiger und stetig differenzierbarer Übergang zwischen den Wellenfunktionen bei $r = r_{<}$ und $r = r_{>}$. Dabei wird $k_{<}$ i.A. komplex. Wir

bestimmen $r_<$ innerhalb eines vorgegebenen Intervalls so, daß der Imaginärteil von $k_<$ minimal wird. Durch dieses Anpassen wird simuliert, daß transmittierter und reflektierter Teil der Welle ohne Reflexion den Kasten verlassen. Durch den einlaufenden Term $be^{-ik_>r}$ wird Fluß der vorgegebenen Energie $E = \hbar^2 k_>^2 / 2\mu + V(r_>)$ in den Kasten nachgespeist. $k_>$ ist dabei die lokale Wellenzahl bei $r = r_>$. Die Zeitentwicklung bewirkt, daß Anteile zu anderen Energien, die in der Anfangswelle enthalten waren, aus dem Kasten herausgestreut werden. Übrig bleibt die gesuchte stationäre Eigenfunktion. Abb. 9 zeigt die Zeitentwicklung für stationäre Streuung an einem eindimensionalen Woods – Saxon Potential (Höhe 100 MeV, Radius 5 fm)

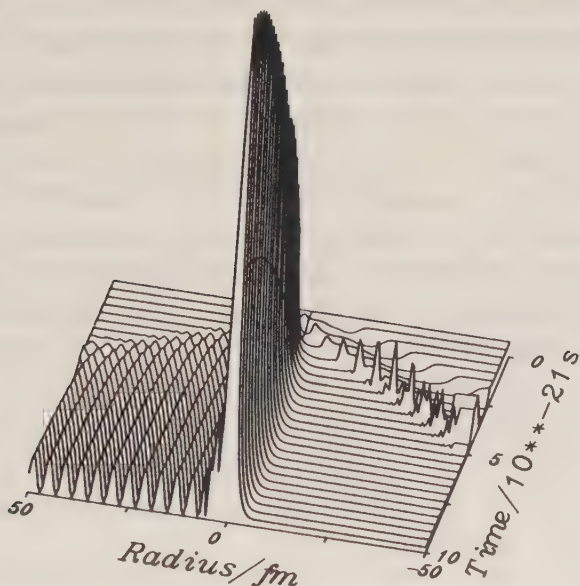


Abb. 9. Berechnung einer stationären Wellenfunktion mit dem Wellenpaketalgorithmus bei Streuung an einem repulsiven Woods – Saxon Potential. Aufgetragen ist das Betragsquadrat der Wellenfunktion als Funktion von Zeit (von hinten nach vorn) und des Orts (von rechts nach links). Die Welle läuft von der linken Seite her ein, ihre Energie ist mit 100 MeV genauso hoch wie die der Barriere.

Die Zeitentwicklung in Abb. 9 verläuft von hinten nach vorne. Ganz

hinten ist eine als ebene Welle gewählte Anfangsfunktion aufgetragen, die im Lauf der Zeit nach rechts aus dem Kasten hinausläuft, gefolgt von einer Störung aus dem Bereich der Barriere. Auf der linken Seite baut sich aus einlaufender und reflektierter Welle langsam eine stehende Welle auf. Deren Wellenlänge ist bedingt durch die geringe Auflösung der Graphikroutine erheblich kürzer als im Bild dargestellt. An der Barriere bildet sich eine Resonanz heraus. Am Ende stellt sich die stationäre Streuwelle ein. Bis zur endgültigen Konvergenz muß die Zeitentwicklung etwa doppelt so lange durchgeführt werden wie in Abb. 9.

Rechnungen für realistische eindimensionale Potentiale ergaben, daß die Konvergenz des Verfahrens sehr davon abhängt, ob Gleichung (2.47) die Randbedingungen richtig wiedergibt, das heißt im Besonderen, ob das Potential am Rand als hinreichend konstant angesehen werden kann. Die im Zusammenhang mit Fusionsreaktionen verwendeten Potentiale zeigen (u.a. wegen des Coulombanteils) einen langreichweitigen Abfall. Die Anpassung müßte daher bei grossen Radien durchgeführt werden. Die Verwendung von Coulombfunktionen ist wegen derer komplizierten Berechnung schwierig. Es würde daher für zweidimensionale Berechnungen sehr viel Speicherplatz benötigt, der nicht zur Verfügung stand.

2.5 Anfangswellenpakete

Die radiale Form des Anfangswellenpakets wird experimentell durch die Erzeugung der Teilchen in der Ionenquelle und durch den Beschleunigungsvorgang bestimmt. Für die Rechnungen kann man es weitgehend beliebig wählen, da seine Impulsverteilung durch Gleichung (2.4) bzw. (2.17) explizit berücksichtigt wird. Wir verwenden asymptotisch (d.h. von positiven Radien her) einfallende Gauß – Wellenpakete der Form

$$\Psi(r) = (\sigma\sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-(r-r_0)^2/2\sigma^2 - ik_0 r} \quad (2.48)$$

am Anfangsort r_0 mit dem Impulserwartungswert $k_0 > 0$. Sie zeichnen sich durch einfaches analytisches Verhalten und dadurch aus, daß sie minimal zerfließen, da für sie das Produkt aus Orts- und Impulsschärfe den Minimalwert annimmt $\Delta r \Delta p = \hbar$. Die Impulsverteilung ist gegeben durch

$$\Psi(k) = (\sigma/\sqrt{\pi})^{1/2} e^{-\sigma^2(k+k_0)^2/2 - i(k+k_0)r} \quad (2.49)$$

Das vom Unendlichen her einlaufende Teilchen spürt schon bei großen Abständen das abstoßende Coulombpotential. Um die Streuung daran zu berücksichtigen, ohne den Anfangsradius unhandlich groß wählen zu müssen, was zu langen Lauf- und damit Rechenzeiten und außerdem zum Auseinanderlaufen des Pakets führen würde, konstruieren wir als Anfangszustand 'Coulombwellenpakete'. Diese ergeben sich, wenn man in der Fourierentwicklung des asymptotischen Gauß – Pakets

$$\Psi(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk \Psi(k) e^{-ikr}$$

die ebenen Wellen durch einlaufende Coulombwellen $H_l^-(kr)$, die stationären Lösungen für das Coulombpotential, ersetzt.

$$\Psi(r) = \int dk \Psi(k) H_l^-(kr) \quad (2.50)$$

Das Anfangswellenpaket kann dann so gewählt werden, daß seine

Ausläufer gerade noch nicht mit dem Kernpotential überlappen. Die Berechnung der Coulombwellenpakete erfolgte durch numerische Auswertung von (2.50) mittels Gaußintegration. Abb. 10 zeigt die Transmission für den eindimensionalen Fall als Funktion des Anfangsorts für Gauß- und Coulomb-Wellenpakete, relativ zum exakten Wert, der sich durch Faltung der stationären Ergebnisse mit der Impulsverteilung des Wellenpakets ergibt.

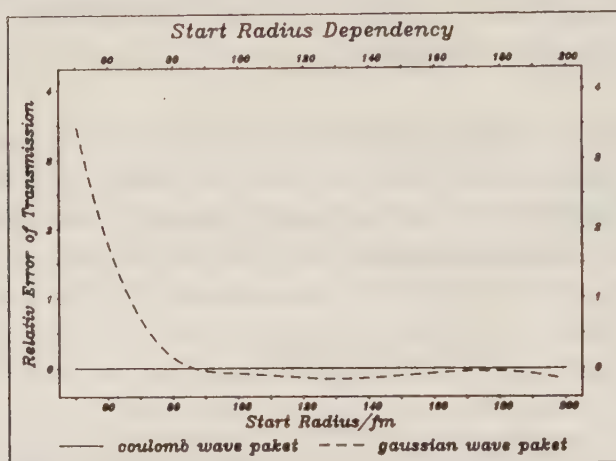


Abb. 10. Transmission als Funktion des Anfangsorts für eindimensionale Gauß- und Coulombwellenpakete relativ zum exakten Wert (Faltung der stationären Lösung). Coulombwellenpakete entstehen durch Faltung einer vorgegeben Impulsverteilung mit einlaufenden Coulombwellenfunktionen. Auf Grund der Berücksichtigung von Coulomb- und Zentrifugalpotential sind die Ergebnisse für Coulombwellenpakete praktisch nicht vom Anfangsort abhängig.

Die Ergebnisse für Coulombpakete sind weitgehend unabhängig von Anfangsort, unterscheiden sich aber um circa 1% vom richtigen Wert. Die Abweichungen sind durch Fehler bei der numerischen Integration von Gl. (2.50) zu erklären.

Die Transmission von Gaußwellen weicht für kleine Startradien stark vom richtigen Wert ab, konvergiert aber mit zunehmenden Radius.

Die Form der Anfangswellenpakete für die anderen Freiheitsgrade wird

dadurch festgelegt, daß hier gebundene Zustände vorliegen. Im Experiment befinden sich die Kerne vor der Reaktion immer im Grundzustand. Dessen Wellenfunktion stellt somit die Form des Anfangswellenpakets der zusätzlichen Freiheitsgrade dar. Durch diesen Ansatz werden die Grundzustandsschwingungen (zero – point motion) der Kerne (siehe Abschnitt 1.2.1) exakt berücksichtigt. Die Zeitentwicklung auf einer mehrdimensionalen Potentialfläche beschreibt damit sowohl die statischen als auch die dynamischen Aspekte der zusätzlichen Freiheitsgrade quantenmechanisch konsistent.

Das gesamte Anfangswellenpaket ist das Produkt der radialen Welle mit den stationären Grundzuständen der weiteren Koordinaten s :

$$\Psi(r,s) = \Psi(r)\varphi(s) \quad (2.51)$$

Dieser einfache Produktansatz kann gewählt werden, da der Startort r_0 so bestimmt werden muß, daß dort die Kopplung zwischen den Freiheitsgraden vernachlässigbar ist.

2.6 Vergleich von Wellenpaket – und CC – Verfahren

Wie in Abschnitt 2.3 erklärt, kann man das diskretisierte Wellenpaketverfahren in jeder der Dimensionen auffassen als Entwicklung nach ebenen Wellen, bzw. nach den Eigenfunktionen $\varphi_m = \sin(k_m x) / \sqrt{2}$ des unendlich tiefen Potentialtopfs, wenn man als Randbedingung verlangt, daß die Welle am Kastenrand verschwindet.

Es werden ebensoviele ebene Wellen bzw. Kasteneigenfunktionen eingeschlossen, wie Stützpunkte benutzt werden. Die Fehler bei der numerischen Berechnung der Ableitung bewirkt, daß die höchsten Eigenfunktionen nicht mehr exakt dargestellt werden, sie haben eine niedrigere kinetische Energie, als die wirklichen Eigenfunktionen.

Für einen Vergleich zwischen dem CC – und dem Wellenpaketverfahren kann man die Fouriertransformierte der den Kanälen entsprechenden Eigenfunktionen des zweiten Freiheitsgrads betrachten. Das

Wellenpaketverfahren schneidet die Impulsverteilung beim Impuls $k_{\max}$ ab, darunter existiert ein Bereich $k_{\max} > k > k_{\text{num}}$, in dem sich die numerischen Fehler bemerkbar machen, während Kanäle, deren Impulsverteilung auf den Bereich unterhalb von k_{num} beschränkt ist, exakt behandelt werden.

Treten in dem Problem Kopplungen auf, die das Potential im wesentlichen nur verschieben, ohne seine Form zu ändern (z.B. lineare Kopplung an das Potential eines harmonischen Oszillators), so können bei einer Entwicklung der 'verschobenen' Eigenzuständen nach den ursprünglichen sehr viele Terme für eine CC - Entwicklung notwendig sein. Das Wellenpaketverfahren erfordert in diesem Fall keinen zusätzlichen Aufwand, d.h. keine erhöhte Zahl von Stützpunkten, da man der Welle durch Verschiebung des Kastens, d.h. des abgetasteten Ortsraumintervalls folgen kann.

Die Gesamtzahl der benötigten Punkte N im 2. Freiheitsgrad wird festgelegt durch die maximale Ausdehnung der Wellenfunktion L geteilt durch die für die Impulsauflösung benötigte Schrittweite. Für die n -te Eigenfunktion in einem harmonischen Oszillator Potential erhält man /64/ :

$$N = L/\epsilon \approx \Delta x \Delta p / \hbar = \sqrt{\langle x^2 \rangle \langle p^2 \rangle} / \hbar = n + 1/2$$

Es gilt also auch für dieses Potential, daß die Anzahl der eingeschlossenen Kanäle etwa gleich der Punktzahl ist, wenn man die Näherung macht, daß die mittlere Breite der Eigenfunktionen gleich ihrer Gesamtbreite ist. Diese Näherung ist leider gerade bei den niedrig liegenden Kanälen schlecht. Hier erfordert die Abtastung der 'Schwänze' der Wellenfunktion ($x > \Delta x, p > \Delta p$) erheblich mehr Punkte, als es die obige Abschätzung erwarten läßt. Dadurch ergibt sich der hohe numerische Aufwand des Wellenpaketverfahrens. Für das schematische Halsmodell (siehe Kapitel 3.3) benötigte der Wellenpaketalgorithmus pro Partialwelle bei Verwendung von 50 Punkten für den 2. (Hals) Freiheitsgrad und 1000 Punkten in radialer Richtung eine Rechenzeit von ca. 400

Sekunden auf dem Rechner Cyber 180 – 990 unseres Rechenzentrums, davon 23 Sekunden zur Berechnung des Anfangswellenpakets. Eine CC – Rechnung mit 10 Kanälen, die für dieses Problem bei Benützung der adiabatischen Basis /26/ ausreichend sind, benötigte nur 61 Sekunden Rechenzeit. Zur Integration der gekoppelten Gleichungen wurde hier allerdings im Gegensatz zur Originalarbeit ein Runge – Kutta Verfahren 6. Ordnung verwendet, um die gleiche Genauigkeit wie beim Numerov – Verfahren zu erzielen. Das Wellenpaketverfahren erfordert also ca. 6.5 mal mehr Rechenzeit als die Rechnung mit gekoppelten Kanälen. Dabei sind jedoch erheblich mehr Kanäle als bei der CC – Rechnung enthalten.

Zum Vergleich : Der Vektorrechner Cray X – MP des Max – Plank Instituts benötigt bei Verwendung einer optimal vektorisierten Programmversion knapp 20 Sekunden pro Partialwelle, davon fast 4 Sekunden für das Anfangswellenpaket.

Der numerische Aufwand steigt beim Wellenpaketverfahren linear mit der Anzahl der Punkte in jeder Dimension. Bei Integration der CC – Gleichungen mit dem Runge – Kutta Verfahren steigt er quadratisch (Multiplikation der Potentialmatrix mit dem Vektor der Kanalwellenfunktionen), bzw. sogar mit der 3. Potenz der Kanalzahl beim Numerov Verfahren (bedingt durch eine Matrixmultiplikation) an. Bei wenigen Kanälen liegt der Aufwand des Numerov – Algorithmus allerdings deutlich unter dem des Runge – Kutta Verfahrens (vergleiche Anhang A mit Ref. /65/, Abschnitt 10.2.3)

Wenn jedoch viele Kanäle berücksichtigt werden müssen, rückt der Aufwand für CC – Rechnungen zunehmend in die Nähe desjenigen für das Wellenpaketverfahrens.

3. Fusionswirkungsquerschnitte

In Kapitel 3 stellen wir die untersuchten Potentialmodelle mit den darin enthaltenen Freiheitsgraden vor und diskutieren die resultierenden Fusionswirkungsquerschnitte. In allen Modellen verwenden wir für die Radialabhängigkeit der Wechselwirkung der Kerne das von Krappe, Nix und Sierk /50/ entwickelte makroskopische Potential.

Im ersten Abschnitt beschreiben wir dieses Potential und die Methoden zu seiner Berechnung.

Die Ergebnisse von stationären und Wellenpaketrechnungen vergleichen wir im zweiten Abschnitt anhand des eindimensionalen Modells, und diskutieren die Auswirkung der endlichen Energieunschärfe der Wellenpakete auf die Fusionswirkungsquerschnitte.

Neben diesen Rechnungen benutzen wir im dritten Abschnitt ein zweidimensionales Modell, für das Ergebnisse von Rechnungen mit gekoppelten Kanälen vorliegen, als Test für den Wellenpaketalgorithmus. Als zweiter Freiheitsgrad wird dabei eine schematischer Ansatz verwendet, der die Ausbildung eines Halses zwischen den Kernen simuliert. Wir finden, daß der Wellenpaketalgorithmus verlässliche Ergebnisse liefert.

In Abschnitt 4 untersuchen wir ein Modell, welches als zweiten Freiheitsgrad axialsymmetrische Deformationen beider Kerne verwendet. Wir vergleichen unsere Ergebnisse mit denen einer semiklassischen Näherung und finden erhebliche Unterschiede bei der quantenmechanisch exakten Behandlung. Allerdings werden die experimentellen Daten in diesem Modell nicht beschrieben. Wir untersuchen außerdem ein- und zweidimensionale adiabatische Näherungen an dieses Potential.

Im fünften Abschnitt werden die Formen der Kerne mit drei Rotationsflächen zweiter Ordnung (three quadratic surfaces) parametrisiert, und das KNS-Potential durch numerische Integration über diese Formen bestimmt. Wir untersuchen dabei wieder Deformationen der Kerne und zusätzlich die Ausbildung eines Halses zwischen ihnen. Der Halsfreiheitsgrad wird in diabatischer (d.h. die Kerne bilden keinen Hals

aus) bzw. adiabatischer (Minimalisierung der Wechselwirkungsenergie) Näherung behandelt.

Da auch die Fusionswirkungsquerschnitte dieses Modells unter den experimentellen liegen, wird noch ein anderer, in der Literatur gebräuchlicher Satz von Parameter für das KNS – Potential getestet. Wir finden nun befriedigende Übereinstimmung zwischen den experimentellen Ergebnissen und denen mit adiabatischer Behandlung des Halsfreiheitsgrads.

3.1 Das Krappe – Nix – Sierk Potential

Für die Berechnung der Energieflächen verwenden wir das Krappe – Nix – Sierk (KNS) Potential /50/. Wie in Ref. /4/ gezeigt wurde, beschreibt es die experimentellen Daten für leichte Systeme, von denen man weiß, daß bei ihnen eindimensionale und adiabatische Barriere und der Fissions Sattelpunkt zusammenfallen /26/, sehr gut.

Das KNS – Potential ist ein Doppelfaltungspotential mit einer effektiven Wechselwirkung, die aus einem Yukawa – und einem Exponential – Anteil besteht /67/.

$$E_{\text{KNS}} = - \frac{c_s}{8\pi^2 r_0^2 a^3} \int d^3r \int d^3\hat{r} \left(\frac{1}{a} - \frac{2}{\sigma} \right) e^{-\sigma/a}, \quad (3.1)$$

wobei $\vec{\sigma} = \vec{r} - \hat{\vec{r}}$ die Differenz der Radiusvektoren, σ dessen Betrag und a die Reichweite der Wechselwirkung ist. Diese effektive Wechselwirkung ergibt sich als Summe einer attraktiven und einer repulsiven Yukawa Wechselwirkung mit unterschiedlichen Stärken und Reichweiten im Grenzfall gleicher Reichweite. Diese Wechselwirkung beschreibt die Sättigungseigenschaften der Kernmaterie. Das KNS Potential enthält infolge der endlichen Reichweite der Faltungsfunktion die Auswirkungen der diffusen Kernoberfläche und erfüllt das Proximity Theorem /52/ bis zur zweiten Ableitung.

Die Integrationen in (3.1) sind über das gesamte Volumen der Kerne mit scharfer Oberfläche auszuführen. Bei Deformationen der Oberfläche

wird das Volumen konstant gehalten.

Durch Anwendung des Gaußschen Satzes läßt sich (3.1) in ein zweifaches Oberflächenintegral überführen /67/

$$E_{\text{KNS}} = \frac{c_s}{4\pi r_0^2 a^2} \oint \vec{\sigma} d\vec{s} \oint \vec{\sigma} d\vec{s} \frac{1}{\sigma^4} \left[2 - \left(\frac{\sigma^2}{a^2} + 2 \frac{\sigma}{a} + 2 \right) e^{-\sigma/a} \right], \quad (3.2)$$

das man für (in dieser Arbeit ausschließlich betrachtete) axialsymmetrische Konfigurationen auf ein dreifaches Integral in Zylinderkoordinaten reduzieren kann /67/

$$E_{\text{KNS}} = \int d\varphi \int dz \int d\hat{z} \varrho(z, \hat{z}, \varphi) \varrho(\hat{z}, z, \varphi) \frac{1}{\sigma^4} \left[2 - \left(\frac{\sigma^2}{a^2} + 2 \frac{\sigma}{a} + 2 \right) e^{-\sigma/a} \right] \quad (3.3)$$

mit

$$r = r(z) \quad \text{und} \quad \hat{r} = r(\hat{z})$$

$$\varrho(z, \hat{z}, \varphi) = r(z) \left[r^2(z) + r^2(\hat{z}) - 2r(z)r(\hat{z})\cos\varphi - (z - \hat{z})r(z) \frac{dr(z)}{dz} \right]$$

$$\sigma^2 = r^2 + \hat{r}^2 - 2r\hat{r}\cos\varphi + (z - \hat{z})^2$$

Für isolierte sphärische Kerne läßt sich (3.1) analytisch berechnen; man erhält die Grundzustandsenergie.

$$E_{\text{KNS}} = \left[1 - 3 \frac{a^2}{R^2} + \left(\frac{R}{a} + 1 \right) \left(2 + 3 \frac{a}{R} + 3 \frac{a^2}{R^2} \right) e^{-2R/a} \right] E_s^{(0)}, \quad (3.4)$$

wobei

$$E_s^{(0)} = c_s A^{2/3} = a_s (1 - \chi_s I^2) A^{2/3}$$

die Oberflächenenergie eines sphärischen Korns ist. a_s ist die Oberflächen - Energiekonstante, χ_s die Oberflächen - Asymmetriekonstante und I der relative Neutronen Überschuß

$$I = \frac{N - Z}{A}.$$

Das Krappe - Nix - Sierk Potential ist durch die vier Konstanten r_0 , a , a_s und χ_s bestimmt. In Ref. /50/ bzw. Ref. /68/ wurden zwei verschiedene Sätze dieser Konstanten bestimmt.

In der ursprünglichen Arbeit von Krappe, Nix und Sierk ergibt sich

$$\begin{aligned} r_0 &= 1.18 \text{ fm} \\ a &= 0.65 \text{ fm} \\ a_s &= 21.7 \text{ MeV} \\ \chi_s &= 3.0 \end{aligned} \quad (\text{P - KNS})$$

(Die weiteren Terme der in Ref. /50/ aufgeführten Massenformel sind nur von der Gesamtzahl der Protonen bzw. Neutronen abhängig und daher für das Wechselwirkungspotential nicht relevant).

Diese Konstanten wurden dort folgendermaßen bestimmt : Die Radiuskonstante r_0 erhält man aus dem Radius der Ladungsverteilung des Kerns, die man aus der elastischen Elektronenstreuung kennt. Die Beziehung zwischen Massen - und Ladungsradius wird dabei durch eine Thomas - Fermi - Rechnung /69/ hergestellt. Die Reichweite der Nukleonenwechselwirkung a wird durch Analysen von Daten elastischer Schwerionenstreuung im optischen Modell bestimmt. Die Werte von a_s und χ_s werden (unabhängig voneinander) aus dem Vergleich des makroskopischen Beitrags zur Spaltungsbarriere bestimmt.

Ein zweiter Satz von Konstanten wird in Ref. /68/ durch Anpassung an Spaltungsbarrieren und Grundzustandsmassen von Kernen aus einem großen Bereich des Periodensystems bestimmt. Zusätzlich zu den in der Massenformel in Ref. /50/ enthaltenen (Volumen - , Coulomb - , Wigner - , Paarungs - und Einteilchen Korrektur -) Termen werden ein Protonformfaktor, eine exakte Korrektur für die diffuse Kernoberfläche, ein A^0 Term, ein Ladungsasymmetrieterm und mikroskopische Nullpunktsenergien einbezogen. Außerdem wurde ein verbesserter Wert für die Kernradiuskonstante verwendet (Die Thomas - Fermi Rechnungen ergeben eine zu dicke Neutronenhaut und damit einen zu großen Wert für r_0) Es ergibt sich folgender Satz von Parametern (Möller, Nix) :

$$\begin{aligned} r_0 &= 1.16 \text{ fm} \\ a &= 0.68 \text{ fm} \end{aligned} \quad (\text{P - MN})$$

$$a_s = 21.13 \text{ MeV}$$

$$\kappa_s = 2.3$$

Wir verwenden für die meisten Rechnungen (außer dem schematischen Halsmodell in Kapitel 3.3) den zweiten Parametersatz, um Vergleichbarkeit mit dem Deformationsmodell von Landowne und Nix (Kapitel 3.4) zu erhalten. Es zeigt sich jedoch, daß die ursprünglichen Konstanten P - KNS in allen Modellen eine niedrigere Barriere ergeben. Welcher Satz zur Behandlung von Fusionsproblemen richtiger ist, ist unklar /70/.

Das Coulombpotential ist wie üblich

$$V_c = \frac{e_0^2}{2} \int d^3r \int d^3\hat{r} \frac{1}{\sigma} = \frac{\pi e_0^2}{6} \int d\varphi \int dz \int d\hat{z} \frac{1}{\sigma} \varrho(z, \hat{z}, \varphi) \varrho(\hat{z}, z, \varphi) \quad ; \quad (3.5)$$

dabei ist

$$e_0 = \frac{Ze}{V} = \frac{3Ze}{4\pi r_0^3 A}$$

die Ladungsdichte einer homogen geladenen Kugel mit dem Volumen V und der Ladung Ze.

3.2 Eindimensionales Modell

Auch die Wechselwirkungsenergie zweier isolierter sphärischer Kerne läßt sich aus (3.3) analytisch berechnen /67/. Wir geben das Ergebnis für zwei gleiche Kerne der Ladung Ze , der Massenzahl A und dem Radius $R = r_0 A^{1/3}$ an.

$$V_{\text{KNS}} = -\frac{D}{r} \left(F + \frac{r}{a} \right) e^{-r/a} \quad (3.6)$$

mit

$$D = 4A^{2/3} g^2(R/a) a_i (1 - \kappa_i I^2)$$

$$F = 4 - 2 \frac{f(R/a)}{g(R/a)}$$

$$g(x) = x \cdot \cosh(x) - \sinh(x)$$

$$f(x) = x^2 \sinh(x)$$

Das Coulombpotential ist das zwischen zwei Punktladungen

$$V_c = \frac{Z^2 e^2}{r}$$

Das Gesamtpotential für die ℓ -te Partialwelle ergibt sich als Summe aus Kern-, Coulomb- und Zentrifugalpotential

$$V(r) = V_{\text{KNS}}(r) + V_c(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2\mu r^2}, \quad (3.7)$$

wobei μ die reduzierte Masse des Kern-Kern Systems ist.

Für leichte bis mittelschwere Ionen liegt die sich ergebende Barriere bei einem Radius, bei dem sich die Kerne noch nicht berühren. Somit läßt sich die Fusion in Fällen, wo nur die Höhe und Scheitelkrümmung der Barriere benötigt wird, wie z.B. für die Hill-Wheeler Näherung, durch Gleichung (3.7) beschreiben. Für unsere, d.h. für IWBC Rechnungen, benötigen wir jedoch auch das Potential im Bereich $r < 2R$, wo die Kerne bereits überlappen.

Wir approximieren hier das Coulombpotential zwischen den Kernen

durch das einer homogen geladenen Kugel, um Volumeneffekte zumindest näherungsweise zu berücksichtigen, und um ein unphysikalisch starkes Ansteigen zu vermeiden.

$$V_c(r < 2R) = \frac{Z^2 e^2}{4R} \left(3 - \frac{r^2}{4R^2} \right) \quad (3.8)$$

Die gestrichelte Linie in Abb. 11 zeigt das sich ergebende s - Wellen Potential für das System $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$. Die Barriere liegt bei einem Radius $r_b = 10.1$ fm und einer Energie $V_b = 102.1$ MeV.

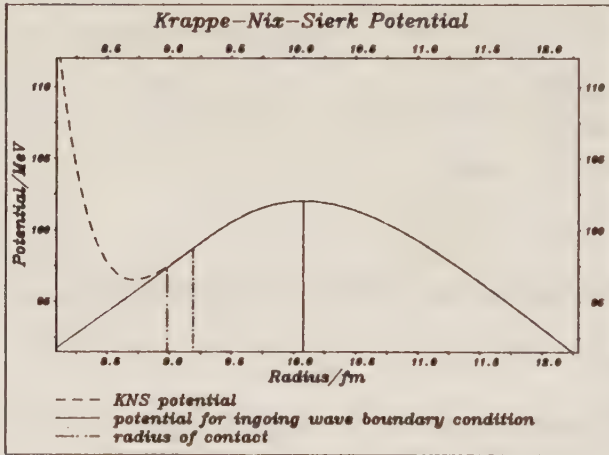


Abb. 11. Eindimensionale Barriere für das Krappe - Nix - Sierk Potential. Die gestrichelte Kurve ist das Potential mit dem abstoßenden Kern, der sich aus der Sättigungseigenschaft der Nukleon - Nukleon Wechselwirkung ergibt. Die durchgezogene Linie ist das für die Randbedingung der einlaufenden Wellen angepasste, 'abgeschnittene' Potential. Die Anpassung erfolgt im Wendepunkt der Kurve.

Für die Randbedingungen einlaufender Wellen (IBWC, siehe Abschnitt 1.1) schneiden wir den abstoßenden Kern innerhalb der Barriere am Wendepunkt r_c des Potentials (dort ist die Steigung maximal) mit einer stetig differenzierbar angepaßten Exponentialfunktion ab:

$$V(r < r_c) \rightarrow V_{\text{cut}}(r) = V(r_c) e^{(r - r_c) V'(r_c)/V(r_c)} \quad (3.9)$$

Sie ist durch die durchgezogene Linie in Abb. 11 dargestellt. Die kinetische Energie ist wie üblich gegeben durch

$$T = \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2}$$

Die Masse der Radialbewegung wird immer als die reduzierte Masse μ des Systems angenommen. Bei getrennten sphärischen oder spheroidal deformierten Kernen ist diese Annahme exakt. Unter der Barriere und bei Anregung bestimmter Freiheitsgrade kann der wahre Trägheitsparameter davon abweichen. Da es jedoch keine verlässlichen theoretischen Modelle zur Berechnung der Massen gibt, verwenden wir auch hier die reduzierte Masse.

Abb. 12 zeigt die resultierenden Fusionswirkungsquerschnitte des ein-dimensionalen Modells. Die strichpunktierte Kurve ist das Ergebnis der stationären Rechnung, das wir aus einer numerischen Integration der Schrödingergleichung erhalten. Dabei wird die Rawischer Form /46/ der IBWC verwendet, wobei die Wellenfunktion an eine einlaufende WKB Wellenfunktion angepaßt wird.

Die beiden fast zusammenfallenden (durchgezogenen bzw. gestrichelten) Linien stellen den Wellenpaketwirkungsquerschnitt dar, einmal berechnet mit dem Wellenpaketalgorithmus Gl. (2.26), zum anderen durch Faltung des stationären Ergebnisses mit der Impulsverteilung des Wellenpakets nach Gl. (2.17). Die Übereinstimmung der Kurven ist ausgezeichnet. Die Breite des Wellenpakets beträgt in dieser wie auch allen weiteren Rechnungen $\sigma = 7$ fm was einer relativen Energieunschärfe von

$$\frac{\Delta E}{E_0} = 2 \frac{\Delta k}{k_0} = \frac{2}{\sigma k_0} \approx 2.4 \%$$

entspricht.

Die Anhebung des Fusionsquerschnitts für das Wellenpaket gegenüber der stationären Rechnung erklärt sich aus dem Beitrag der Wellenpaketkomponenten mit Energien oberhalb seiner mittleren Energie zur Trans-

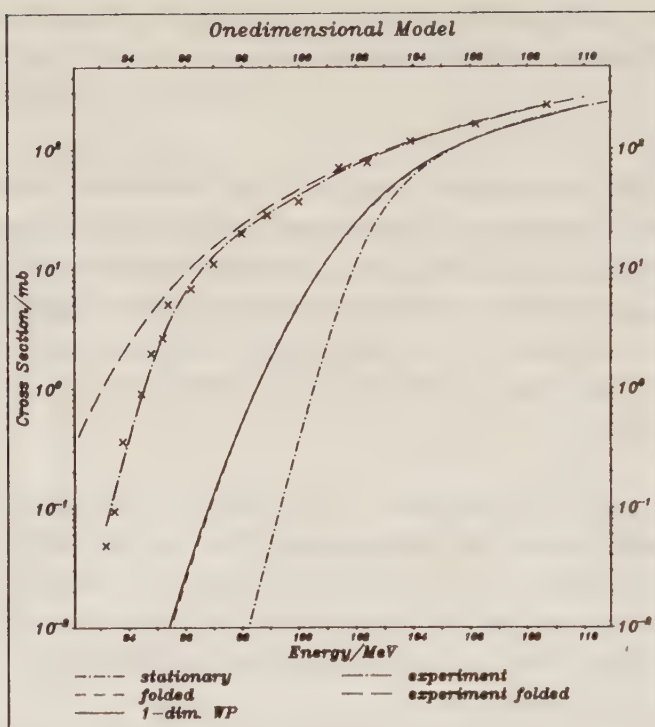


Abb. 12. Stationäre und Wellenpaketwirkungsquerschnitte des eindimensionalen Modells verglichen mit dem Experiment. Die gestrichelte Kurve ist der aus der stationären Rechnung durch Faltung mit der Impulsverteilung des Wellenpaket gewonnene Wellenpaketwirkungsquerschnitt. Er ist praktisch identisch zu dem Ergebnis, das sich mit dem Wellenpaketalgorithmus ergibt. Daten aus Ref. /7/

mission. Auf Grund des starken (exponentiellen) Anstiegs der Kurven können auch geringe Anteile hoher Energie einen großen Beitrag liefern.

Für Energien weit unter - (ober -) der Barriere läßt sich die Faltung mit Gaußpaketen analytisch ausführen, wenn man den stationären Wirkungsquerschnitt durch die Wong - Formel Gl. (1.4) parametrisiert, der bis auf einen Faktor $1/E$ durch eine exponentielle (lineare) Energieabhängigkeit gegeben ist.

$$\sigma_W(E \ll V_b) = \frac{\sigma_0}{\lambda E} e^{\lambda(E - V_b)}$$

$$\sigma_W(E \gg V_b) = \frac{\sigma_0}{E} (E - V_b).$$

Damit ergibt sich der Fusionsquerschnitt für ein Wellenpaket, dessen Energie unter der Barriere liegt, zu

$$\sigma_{WP}(E \ll V_b) = \sqrt{x} \frac{\sigma_0}{\lambda E} e^{\lambda x(E - V_b/x)} \approx \frac{\sigma_0}{\lambda E} e^{\lambda x(E - V_b/x)}$$

mit

$$x = \left(1 - \frac{\hbar^2 \lambda}{2\mu \sigma^2}\right)^{-1} \approx 1 + \frac{\Delta E}{4E} \lambda \Delta E$$

Bei der letzten Umformung wurde verwendet $\Delta E/E = 2\Delta k/k = 2/\sigma k$. Der Faktor $\sqrt{x}$ wurde in die Exponentialfunktion gezogen, wo er dann gegen V_b vernachlässigt werden kann.

Der gefaltete Wirkungsquerschnitt zeigt also im logarithmischen Maßstab eine um den Faktor x (im vorliegenden Beispiel ist $x = 1.032$) größere Steigung, bei einer auf V_b/x verminderten 'effektiven' Barriere, die für die Verschiebung der Kurve zu niedrigeren Energien verantwortlich ist.

Oberhalb der Barriere erhält man :

$$\begin{aligned} \sigma_{WP}(E \gg V_b) &= \sigma_0 \left(1 + \frac{1}{2\sigma^2 k^2} - \frac{V_b}{E}\right) = \frac{\sigma_0}{E} \left[E \left(1 + \frac{1}{2\sigma^2 k^2}\right) - V_b\right] \\ &\approx \sigma_W(E \gg V_b) \end{aligned}$$

Es ergibt sich gegenüber der stationären Rechnung eine Korrektur zur Energie von der Größenordnung 10^{-4} , die die Tatsache widerspiegelt, daß bei einem Wellenpaket der Energieerwartungswert

$$\langle E \rangle = E_0 \left(1 + \frac{1}{2\sigma^2 k_0^2}\right) = E_0 \left(1 + \frac{\Delta E^2}{8E^2}\right)$$

nicht mit der Energie $E_0 = \hbar^2 k_0^2 / 2\mu$ im Maximum übereinstimmt.

In Abb. 12 sind noch die Meßwerte aus [7] als Kreuze bzw. als

geglättete Kurve eingezeichnet sowie der Wellenpaketwirkungsquerschnitt, der sich durch Faltung der experimentellen Fusionsanregungsfunktion mit der Wellenpaketimpulsverteilung ergibt. Diese Funktion würde einem Experiment gemessen, bei dem Projektilen mit extrem hoher Energieunschärfe (ca. 2.5 %) verwendet würden. Die Ergebnisse der Wellenpaketrechnungen müssen mit diesen Werten verglichen werden. Offensichtlich ist die Beschreibung mit einem Freiheitsgrad nicht ausreichend.

3.3 Das schematische Hals Modell

Bevor wir weitere Freiheitsgrade im realistischen KNS – Modell untersuchen, studieren wir zusätzliche Freiheitsgrade in einem schematischen, exakt lösbaren Modell. Krappe et al. betrachteten den Hamiltonoperator

$$H_{\ell} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V_{\ell}(r) + \frac{\hbar\omega}{2} \left(-\frac{\partial^2}{\partial q^2} + q^2 \right) + \alpha q U(r) \quad (3.10)$$

mit einem linear angekoppelten harmonischen Oszillator als zweitem Freiheitsgrad. Das Radialpotential

$$V_{\ell}(r) = V_c(r) + V_{\text{KNS}}(r) + V_z(r) \quad (3.11)$$

ist die Summe aus dem Coulombpotential für Punktladungen V_c , dem eindimensionalen KNS Potential (3.6) und dem üblichen Zentrifugalpotential V_z . Da Gl. (3.11) wieder nur für getrennte Kerne $r > 2R$ richtig ist, wurde für kleinere Abstände eine Funktion

$$V_{\ell} = e^{r/a} (b_0 + b_1 r + b_2 r^2) \quad r < 2R \quad (3.12)$$

so angepaßt, daß das Potential und seine ersten beiden Ableitungen stetig sind. Als Kopplungsformfaktor in Gl. (3.10) wurde eine Gaußfunktion

$$U(r) = e^{-\frac{(r-r_b)^2}{2\sigma^2}} \quad (3.13)$$

mit dem gleichen Zentrum und mit der doppelten Krümmung wie die

s – Wellen Barriere verwendet

$$\frac{d}{dr} V_{\ell=0}(r-r_b) = 0$$

und

$$-\frac{1}{\sigma^2} = \frac{U''(r-r_b)}{U(r-r_b)} = \frac{2V''_{\ell=0}(r-r_b)}{V_{\ell=0}(r-r_b)}$$

Die kurze Reichweite des Formfaktors soll schematisch die erwartete Eigenschaft der Halsbildung wiedergeben, nämlich nur bei geringen Abständen angeregt zu werden.

Als Parameter des KNS Potentials wurde hier der ursprüngliche Satz (P – KNS, siehe Kapitel 3.1) verwendet.

Kopplungsstärke und Oszillatorfrequenz wurden an die Fusionsanregungsfunktion angepaßt. Für $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ ergibt sich

$$\hbar\omega = 1.8 \text{ MeV}$$

$$\alpha = 4.84 \text{ MeV}$$

Abb. 13 zeigt eine Konturdarstellung der Energiefläche für $\ell = 0$.

Die Breite des Kopplungsformfaktors ergibt sich zu $\sigma = 2.39 \text{ fm}$. Die eindimensionale Barriere liegt bei $r_b = 10.26 \text{ fm}$ und hat eine Höhe von $V_b = 100.9 \text{ MeV}$; der Sattel liegt bei demselben Radius, $q = 2.69$ und $V_s = 94.4 \text{ MeV}$.

Das zweidimensionale Tunnelproblem wurde für dieses Potential durch Entwicklung nach einer genügenden Zahl von gekoppelten Kanälen im Freiheitsgrad q exakt gelöst /26/. Wir verwenden dieses Modell zum Test unseres zweidimensionalen Zeitentwicklungsalgorithmus.

Abb. 14 zeigt lang bzw. kurz gestrichelt die Ergebnisse der stationären CC – Rechnung (berechnet mit dem Fortran Programm FUSL von Möhring /71/) bzw. den daraus durch Faltung bestimmten Wellenpaketquerschnitt. Das Ergebniss des Wellenpaketalgorithmus ist als durchgezogene Linie dargestellt. Die Übereinstimmung ist ausgezeichnet. Kleine Abweichungen bei niedrigen Energien sind auf numerische Fehler bei der Berechnung der hier sehr niedrigen Transmissionskoeffizienten

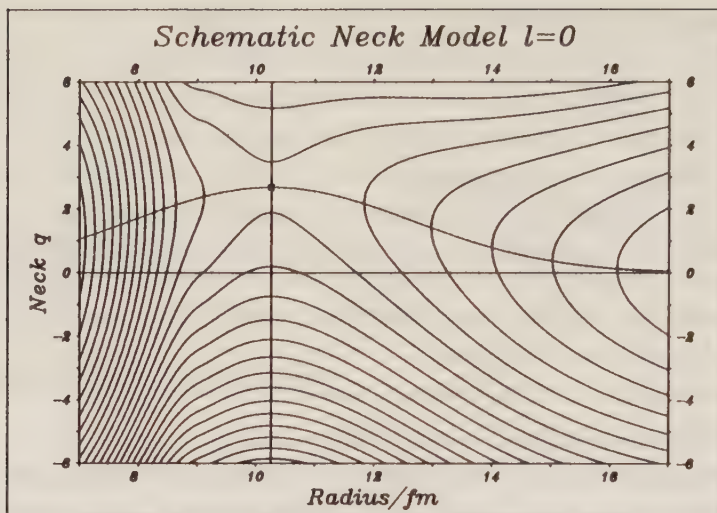


Abb. 13. Die Energiefläche für die s -Welle ($\ell = 0$) im schematischen Halsmodell. Die beiden Linien stellen das Potentialminimum bezüglich des 2. (Hals) Freiheitsgrads (adiabatischer Weg) bzw. den Ort der Barriere dar. Am Schnittpunkt beider Kurven liegt der Sattelpunkt. Die Radialabhängigkeit wird durch das eindimensionale KNS Potential beschrieben, im 2. Freiheitsgrad q wird ein harmonischer Oszillator verwendet. Die Kopplung ist linear in q mit einem Gaußschen Formfaktor.

zurückzuführen (wahrscheinlich in beiden Programmen !).

Damit ist sichergestellt, daß der Wellenpaketalgorithmus geeignet ist, mehrdimensionale Tunnelvorgänge zu untersuchen.

Abb. 15 zeigt das s -Wellenpaket ($\ell = 0$) mit der Energie $E = 98$ MeV (also etwa 2 MeV unterhalb der eindimensionalen Barriere) beim Auflaufen auf die Barriere, die durch den Querstrich dargestellt ist. Bemerkenswert ist die relativ geringe Abweichung des Wellenpaketmaximums vom eindimensionalen Weg $q = 0$ (dicke Linie). Das Tunneln erfolgt weitgehend am Rand des Wellenpakets - d.h. die Erhöhung des Wirkungsquerschnitts ist überwiegend durch die Nullpunktschwingungen im 'Halsfreiheitsgrad' bestimmt. Die Abweichung der

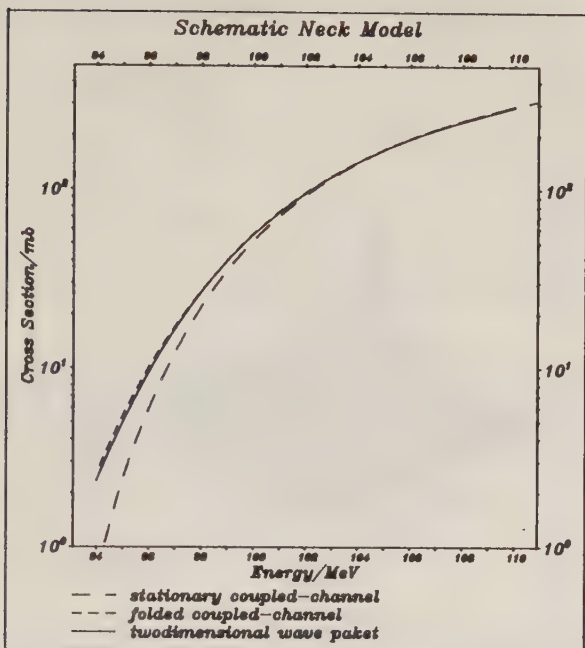


Abb. 14. Fusionswirkungsquerschnitt im schematischen Halsmodell. Die lang gestrichelte Kurve ist der Wirkungsquerschnitt aus einer stationären Rechnung mit gekoppelten Kanälen, der kurz gestrichelte der Wirkungsquerschnitt, der sich daraus durch Faltung mit der Impulsverteilung des Wellenpakets ergibt, und die durchgezogene Kurve ist das Ergebnis des Wellenpaketalgorithmus.

Bahn vom eindimensionalen Weg $q = 0$ spielt erst bei weit niedrigeren Energien eine Rolle.

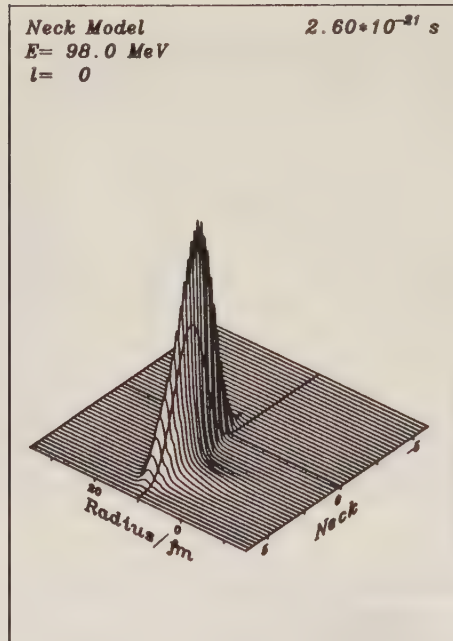


Abb. 15. Momentaufnahme des Wellenpakets während des Auflaufens auf die Barriere im Potential des Halsmodells bei einer Energie von 98 MeV und $l=0$.

3.4 Das Deformations Modell

Obwohl das Halsmodell eine gute Übereinstimmung mit den Meßwerten ergibt /26/, ist die schematische Parametrisierung des zweiten Freiheitsgrads unbefriedigend. Für realistischere Modelle sollten die physikalischen Anregungszustände der Kerne betrachtet werden. Bei vielen Kernen lassen sich die niedrig liegenden Anregungen als Deformation der Form der Kerne beschreiben.

Landowne und Nix untersuchten für das symmetrische System $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ ein Modell, das die getrennten Kerne als achsenparallele Spheroiden (Rotationsellipsoide) beschreibt /75/. Als Koordinaten werden der Schwerpunktsabstand r und die Symmetriehalbachse c' eines Spheroids verwendet. Das Potential ergibt sich im KNS - Modell zu

$$V_l(r,c) = \frac{Z^2 e^2}{r} + \frac{6}{5} \frac{Z^2 e^2 R c}{r^3} + V_{\text{KNS}}(r,c) + \frac{\hbar l(l+1)}{2\mu r^2} + \frac{K}{2} c^2 \quad (3.14)$$

dabei ist $R = r_0 A^{1/3}$ der Radius eines der Kerne, K ist die Oszillatorkonstante für spheriodale Deformationsschwingungen und μ die reduzierte Masse. Die Koordinate c ist im Gegensatz zu /33/ so gewählt, daß $c = 0$ sphärischen Kernen entspricht, also $c = c' - R$. Die Terme stellen der Reihe nach den Mono- und Quadrupolterm des Coulombpotentials, das Kern- und Zentrifugpotential und die Deformationsenergie dar.

In der Behandlung von Landowne und Nix ist das Kernpotential eine Approximation an das KNS Potential, die für sphärische Kerne exakt ist /33,67/. Die Deformationsabhängigkeit wird mit dem Proximity Theorem /52/ behandelt. Es ergibt sich

$$V_{\text{KNS}}(r,c) = - \frac{D}{r(c+R)^2} \left(F + \frac{r-2c}{a} \right) e^{(2c-r)/a} \quad (3.15)$$

In /33/ wurde die Hill Wheeler Approximation benutzt und daher das Potential nur im Bereich der Barriere benötigt, wo die Kerne noch voneinander getrennt sind. Für den Wellenpaketalgorithmus brauchen wir es auch für kleinere Radien. Das Coulombpotential approximieren wir dazu ab dem Berührabstand $r < 2R + 2c$ durch das Quadrupolpotential eines homogen geladenes Spheroids.

$$V_c(r < 2R + 2c, c) = \frac{Z^2 e^2}{4R} \left[3 - \frac{r^2}{4R^2} \left(1 - \frac{3c}{5R} \right) \right]$$

Das Kernpotential wird hinter der Barriere durch Anpassen einer Exponentialfunktion am Punkt r_c der größten Steigung (dem Wendepunkt) entsprechend Gl. (3.9) für alle c glatt nach Null fortgesetzt.

$$V(r < r_c, c) = a(c) e^{b(c)r} \quad (3.16)$$

Der gesamte Hamiltonoperator ist

$$H(r,c) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{B} \frac{\partial^2}{\partial c^2} \right) + V_l(r,c) \quad (3.17)$$

B ist der Trägheitsparameter für spheriodale Deformationen beider Kerne. Die Parameter B und K ergeben sich aus den entsprechenden Werten B_2 und K_2 für die harmonischen Quadrupolschwingungen eines einzelnen Kerns nach

$$B = 2 \frac{4}{5} \pi \frac{B_2}{R^2} = 4.76 \cdot 10^5 \text{ MeV/c}^2$$

$$K = 2 \frac{4}{5} \pi \frac{K_2}{R^2} = 25.9 \text{ MeV/fm}^2$$

Für B_2 und K_2 wurden dabei die Werte verwendet, die Wong aus der Energie und der Halbwertszeit des ersten angeregten 2^+ Zustands ermittelt hat /72/. Für das KNS Potential wurde der Parametersatz (P – MN) aus Ref. /33/ bzw. /50/ übernommen.

Für große Abstände der Kerne verschwinden Kern – und Quadrupolanteil und das Potential entkoppelt zu

$$V_\ell(r \rightarrow \infty, c) = V_\ell(r) + \frac{K}{2} c^2$$

In Deformationsrichtung bleibt nur der harmonischer Oszillator. Als Anfangswellenpaket in dieser Koordinate verwenden wir die Grundzustands – Wellenfunktion dieses Oszillators.

$$\Psi_0(r, c) = \Psi_0(r) e^{-c^2/c_0^2} \quad \text{mit } c_0 = \hbar/\sqrt{KB}.$$

In Abb. 16 ist die sich ergebende Potentialfläche in perspektivischer dreidimensionaler Darstellung (16a) bzw. als Höhenliniendiagramm (16b) abgebildet.

Eingezeichnet sind jeweils der eindimensionale Weg ($c=0$), der adiabatische Weg $c_{ad}(r)$, d.h. die Werte von c , für die das Potential bei festem Radius r sein Minimum annimmt und die Barriere $r_b(c)$. Die Sättigungseigenschaften des KNS Potentials führen (auch ohne den Coulomb – und Zentrifugaltermen) zu einem starken Ansteigen bei kleinen Radien (Soft Core). Der Übergang von Anziehung zu Abstoßung (Vorzeichenwechsel des Potentials) erfolgt etwa bei

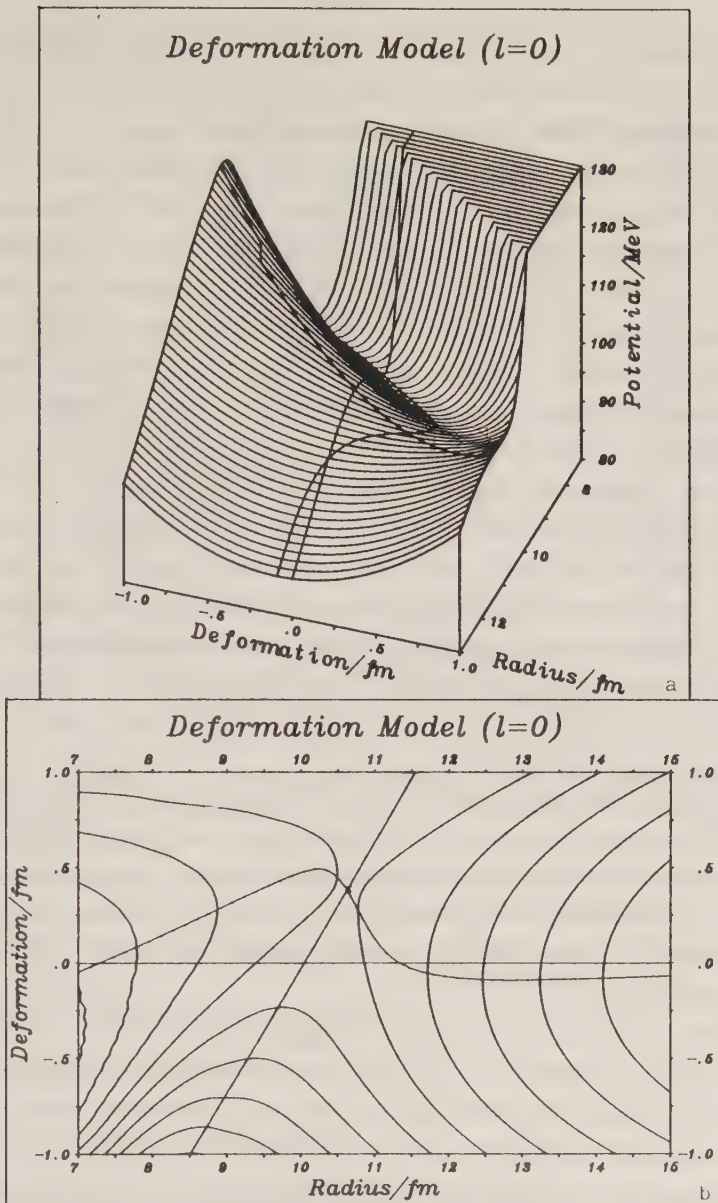


Abb. 16. Die s -Wellen Energiefläche des Deformationsmodells, in perspektivischer Darstellung (a) und als Kontourdarstellung (b). Eingezeichnet sind wieder der adiabatische Weg und der Ort der Barriere. Der Sattelpunkt liegt auf der Seite prolater Deformationen, während der adiabatische Weg bis fast an die Barriere auf der Seite oblater Deformationen verläuft.

$r = 2c + 7.86 \text{ fm}$. In Abb. 16b ist der Kern nach Gl. (3.16) abgeschnitten. Die Kerne berühren sich bei $r = 2(c + R)$.

Bemerkenswert ist der Verlauf des adiabatischen Weges. Bei großen Radien dominiert die Coulombabstoßung. Das Potentialminimum wird für oblat deformierte Kerne ($c < 0$) angenommen, da die Ladungen dann im Mittel den größten Abstand voneinander haben. Bei Annäherung an die Barriere wird die Deformation im Minimum zunächst zunehmend negativer, bis sie kurz davor mit einem scharfen Knick auf die positive (prolate) Seite zum Sattelpunkt hinüberwechselt. Hier übersteigt die Anziehung durch die Kernkräfte zwischen den Spitzen der (länglichen) Spheroide die Coulombabstoßung zwischen den gesamten Ladungen. Hinter dem Sattelpunkt fällt das Potential entlang des Tals zum Compoundkern hin ab. Da die verwendete Parametrisierung nur für getrennte Kerne ($r > 2c + 2R$) physikalisch sinnvoll ist, lassen sich die Koordinaten des Compoundkerns nicht festlegen. Die eindimensionale Barriere bleibt gegenüber der des eindimensionalen und des Landowne'schen Modells (Kapitel 3.1/3.2/3.4) unverändert, der Sattel liegt bei $r = 10.1 \text{ fm}$, $c = 0.39 \text{ fm}$ und einer Energie von 100.1 MeV .

Abb. 17 zeigt die Ergebnisse für das Deformationsmodell. Aufgetragen sind der Fusionswirkungsquerschnitt für die ein- und zweidimensionalen Wellenpaketrechnungen, die gefalteten Ergebnisse der zweidimensionalen semiklassischen Näherung (/33/ und Gl. 1.5), die gefalteten experimentellen Werte und eine eindimensionale adiabatische Wellenpaket Rechnung.

Für die semiklassische Rechnung werden für jede Anfangsdeformation die Gl. 3.17 entsprechenden 2-dimensionalen Hamiltongleichungen ausgehend von großen Abständen bis zum klassischen Umkehrpunkt an der Barriere gelöst, und von dort aus bei konstant gehaltener Deformation die Transmission mittels der Hill - Wheeler Näherung /2/ bestimmt. Die gesamte Transmission ergibt sich als Summe dieser Transmissionen gewichtet mit der Verteilung der Deformationen.

Die eindimensionale adiabatische Wellenpaket Rechnung benutzt den

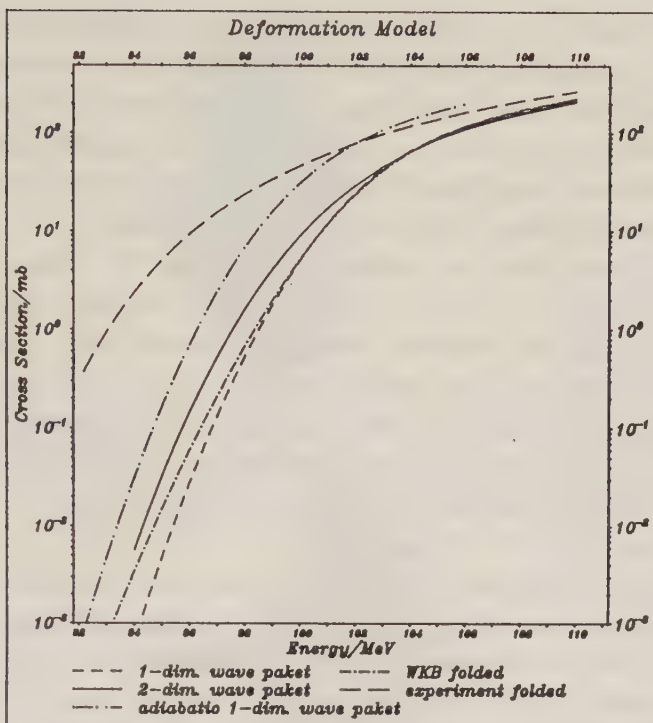


Abb. 17. Vergleich der Wellenpaketwirkungsquerschnitte von eindimensionalem Modell, Deformationsmodell und Experiment. Für das Deformationsmodell ist das Ergebnis der semiklassischen WKB Näherung und der quantenmechanisch exakten Wellenpaketrechnung eingezeichnet. Die quantenmechanische Behandlung ergibt eine Anhebung des Wirkungsquerschnitts gegenüber der WKB Rechnung, ohne aber die experimentellen Werte zu erreichen. Die strichdoppelpunktuelle Linie ist der Wirkungsquerschnitt einer eindimensionalen adiabatischen Rechnung (siehe Text), der eine approximative obere Grenze in diesem Modell bildet.

Hamiltonoperator

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r, c_{ad}(r))$$

Es wird also für jeden Abstand das bezüglich der Deformation mini-
mierte Potential verwendet, entsprechend dem adiabatischen Weg in
Abb. 16. Diese Methode sollte die Fusion überschätzen. Wie zu erwar-

ten ist, verlaufen die Kurven der zweidimensionalen Rechnungen zwischen dem diabatischen (d.h. undeformierte Kerne) und dem adiabatischen eindimensionalen Ergebnissen. Die quantenmechanisch exakten Wellenpaketrechnung ergibt zwar eine deutliche Erhöhung der semiklassischen Näherung, liegt jedoch bei niedrigen Energien immer noch um fast 3 Größenordnungen unter den experimentellen Werten.

Abb. 18 zeigt Bilder der Wellenpakete während des Ablaufs der Reaktion. Qualitativ ergibt sich für alle Potentiale, Energien und Drehimpulse ein ähnliches Verhalten, solange die Energie nicht wesentlich über der Barriere liegt. Wir wählen daher als Beispiel eine Energie, die mit 100 MeV in etwa gleich der des Sattels ist. Eingezeichnet sind jeweils die Linien $c = 0$ (der eindimensionale Weg) und der Ort der Barriere. Die Zeiten werden ab dem Start des Anfangswellenpakets von seinem Startort ($r_0 = 50$ fm) gezählt.

Das erste Bild zeigt die Welle auf dem Weg zwischen Startort und Barriere. Man erkennt bereits eine leichte Abweichung des Maximums in Richtung oblater Deformation ($c < 0$). Im zweiten Bild ist die Welle beim Auftreffen auf die Barriere zu sehen. Das Maximum ist noch weiter zu negativen Deformationen verschoben, während das Tunneln praktisch ausschließlich im Bereich des Sattels, also über prolate Formen erfolgt. Die mittlere Deformation der Welle ist schon leicht positiv ($c = 0.07$ fm). Nach Abschluß der Reaktion (Abb. 18c) haben sich reflektierter und transmittierter Teil getrennt. Die Breite des reflektierten Pakets in Deformationsrichtung hat leicht (in der Graphik kaum sichtbar) zugenommen und ändert sich (schwingt) mit der Zeit. Das zeigt an, daß inelastische Anregung des 2^+ und höherer Niveaus stattgefunden hat. Seine radiale Form hat sich nur wenig verändert. Der transmittierten Teil läuft langgestreckt in das Fissionstal hinein (und wird dann am Kastenrand reflektiert). Er stellt den hoch angeregten Compoundkern dar. Seine Länge erklärt sich durch zerfallende Resonanzen im Bereich der Barriere.

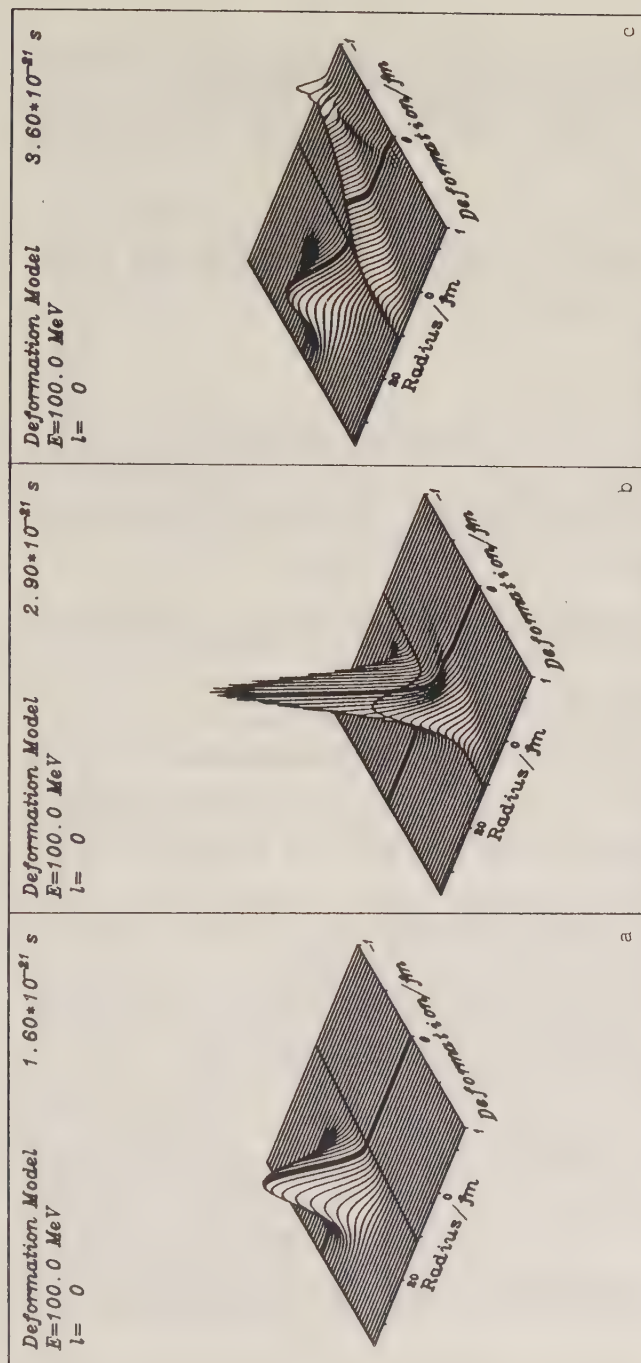


Abb. 18. Momentaufnahmen des Wellenpakets während der Zeitenentwicklung im Potential des Deformationsmodells bei einer Energie von 100 MeV und $l=0$. Eingetragen sind der Ort der Barriere und der eindimensionale Weg. Abb. 20a zeigt das einlaufende Wellenpaket unmittelbar vor dem Auftreffen auf die Barriere, 20b beim Stoß und 20c nach Abschluß der Reaktion. Die Bilder werden im Text diskutiert.

Da in diesem Modell das Potential analytisch gegeben, und somit leicht handhabbar ist, wurden für diesen Fall die Einflüsse der Kopplung an den zweiten Freiheitsgrad und eine zweidimensionale adiabatische Näherung untersucht.

Eine ungekoppelte Wellenpaketausbreitung wird dadurch definiert, daß das Anfangswellenpaket $\Psi(r;c)$ für jede Deformation c einer Zeitentwicklung mit dem Hamiltonoperator

$$H(r;c) = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + V(r;c),$$

der c nur noch als Parameter enthält unterworfen wird. Dieses Vorgehen entspricht dem Grenzwert $B \rightarrow \infty$, der Deformationsfreiheitsgrad wird unendlich träge und ergibt daher das Nullpunktsschwingungsbild (zero - point motion /15/) ohne Berücksichtigung der Dynamik.

Das zweidimensionale adiabatische Potential (Abb. 19) ist definiert als

$$V_{ad}(r,c) = V(r, c + c_{ad}(r)),$$

das heißt, der adiabatische Weg auf der Potentialfläche wird auf $c = 0$, also einen geraden Weg abgebildet. Das ist in diesem Modell problemlos durchzuführen, da der Minimumsweg $c_{ad}(r)$ stetig ist, also keine versetzten Täler auftreten.

Die Ergebnisse dieser beiden Grenzfälle sind zusammen mit den eindimensionalen Rechnungen in Abb. 20 dargestellt.

Es zeigt sich, daß die Fusionsanregungsfunktion des ungekoppelten Modells oberhalb der entsprechenden mit Kopplung liegt, in Übereinstimmung mit Ref. /33/. Die Erklärung liegt darin, daß das Wellenpaket vor der Barriere in Richtung des adiabatischen Wegs zu im Mittel oblater Deformation abgelenkt wird. Es kann dann der scharfen Biegung dieses Weges an der Barriere auf Grund seiner Trägheit nicht folgen und stößt immer noch überwiegend oblat deformiert gegen die Barriere. In Abb. 18b ist dies deutlich zu sehen, da das Maximum der Welle bei $c < 0$ liegt. Der Schwerpunkt des Wellenpakets sieht somit eine Barriere,

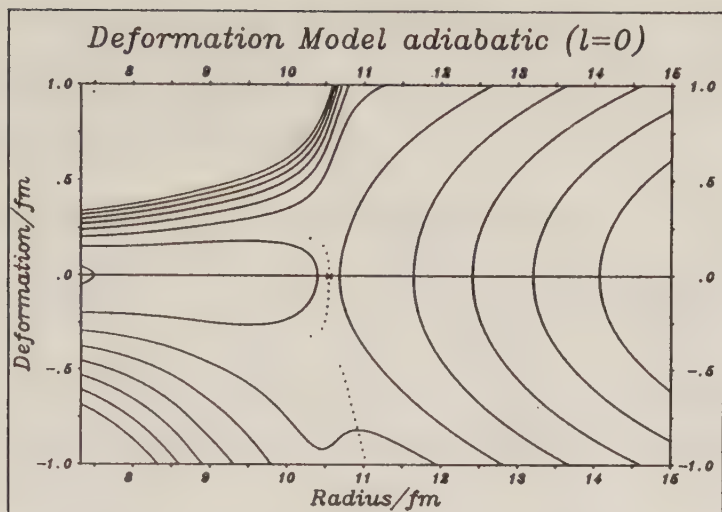


Abb. 19. S-Wellen Energiefläche für die adiabatische Näherung an das Deformationsmodell. Der adiabatische Weg wird auf die Radiusachse $c=0$ abgebildet. Der starke Anstieg des Potentials in der linken oberen Ecke ist ein Rest des abstoßenden Potentialkerns, der durch das verwendete Abschneideverfahren nicht beseitigt werden kann. Die gepunktete Linie stellt den Ort der Barriere dar.

die noch über der eindimensionalen liegt. In Abb. 27 (siehe Abschnitt 3.6) ist die Bahnkurve – d.h. der Ortserwartungswert als Funktion der Zeit – eines Wellenpakets im adiabatischen Hals – Modell, die qualitativ den gleichen Verlauf wie im Deformationsmodell hat, dargestellt. Sie verläuft bis nach dem Stoß auf der Seite oblater Deformationen.

Die Transmission erfolgt jedoch auch hier praktisch ausschließlich über den Sattel, es tragen fast nur Komponenten mit prolater Deformation bei. Die Erhöhung des zweidimensionalen Wirkungsquerschnitt gegenüber dem eindimensionalen ist also im wesentlichen eine Folge der Nullpunktsschwingungen, sie wird durch die Dynamik sogar wieder vermindert. Es ergeben sich also qualitativ die gleichen Resultate wie in der semiklassischen Näherung in Ref. /33/.

Beim adiabatischen Potential liegen die Ergebnisse der 'gekoppelten

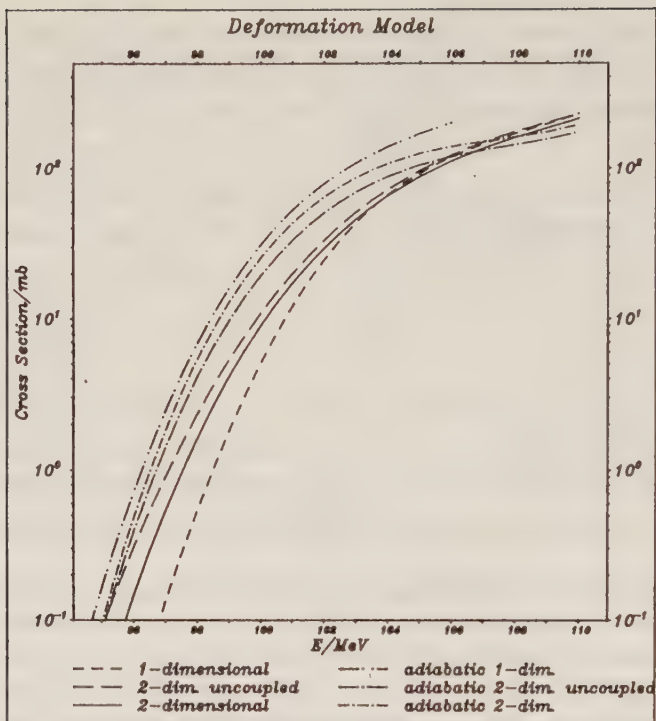


Abb. 20. Vergleich der Wirkungsquerschnitte des eindimensionalen und gekoppelten bzw. ungekoppelten Deformationsmodells in adiabatischer bzw. diabatischer Näherung. Nähere Erläuterungen siehe Text.

Rechnung über denen der ungekoppelten. Der Minimumweg verläuft hier gerade, so daß dynamische Effekte keinen Einfluß haben. Das Wellenpaket kann sich bei der gekoppelten Rechnung beim Überqueren des Sattels nun an die Verbreiterung des Tals anpassen, was zur Verminderung seiner Grundzustandsenergie und somit zur Erhöhung der kinetischen Energie, bzw. im CC - Bild gesehen, zu einer Verminderung der 'effektiven' Barriere führt.

Eigentlich wäre zu erwarten gewesen, daß dieser Effekt ausreicht für eine Erhöhung über das eindimensionale adiabatische Ergebnis hinaus. Wie Abb. 20 zeigt, ist dies nicht der Fall. Die Erklärung dafür liegt in

dem starken Anstieg des Potentials unmittelbar hinter dem Sattel auf der Seite positiver Deformationen (Abb. 19). Dieser Anstieg führt zu kräftigen Reflexionen. Er ließ sich durch das einfache Abschneideverfahren nach Gl. (3.16) nicht beseitigen.

3.5 Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen

Wie bemerkt (Abb. 17), liegt der Wirkungsquerschnitt im Deformationsmodell noch weit unter den experimentellen Daten. Dies liegt, wie auch CC - Rechnungen /57/ zeigen, nur zum Teil an der Näherung (3.15) für die Deformationsabhängigkeit des Potentials. Offensichtlich spielen bei der Fusion weitere Freiheitsgrade eine Rolle. Naheliegende Möglichkeiten sind :

- 1) Andere Deformationen wie höhere Multipole (Oktupol ...) und unterschiedliche (asymmetrische) Deformationen der beiden Kerne, und
- 2) Transferfreiheitsgrade.

Leider können wir mit der Wellenpaketmethode aus praktischen Gründen nur zweidimensionale Rechnungen durchführen, was nur die Untersuchung eines zusätzlichen Freiheitsgrads bei voller Berücksichtigung seiner Dynamik erlaubt. Jedoch soll ein weiterer wesentlicher Freiheitsgrad näherungsweise betrachtet werden, nämlich die Ausbildung eines Halses zwischen den Kernen. Dieser ist einerseits ein Beispiel für allgemeinere (aber immer noch symmetrische) Deformationen der Kerne, wie sie besonders bei geringem Abstand auftreten können, andererseits läßt sich auf diese Weise kollektiver Massenaustausch zwischen den Kernen simulieren. Da wir nur symmetrische Formen betrachten, enthält unser Modell nicht den Transfer von einzelnen Nukleonen, sondern nur einen mehrfachen, symmetrischen Austausch von Teilchen.

Beide physikalischen Effekte sind offenbar wichtig zur Beschreibung von Fusionsreaktionen, wie das schematische Hals - Modell /26/ und

CC – Rechnungen /19 – 22,57/ zeigen. Experimentell findet man, daß Subcoulombtransfer sehr stark ist /73/.

Deformation und Halsbildung läßt sich gemeinsam im kollektiven Modell durch die Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen (three quadratic surfaces /74/) beschreiben. Die Form der beiden Kerne wird dabei durch Rotationsellipsoide (Spheroide) dargestellt, die durch ein einschaliges Hyperboloid oder Spheroid verbunden sind (Hals), bzw. denen in Form eines zweischaligen Hyperboloids 'Nasen' aufgesetzt werden. Abb. 21 zeigt Beispiele der sich ergebenden Formen.

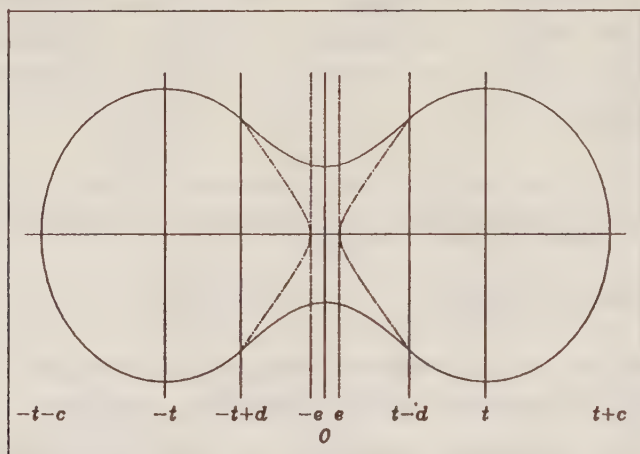


Abb. 21. Formen des Systems aus zwei Kernen, die man durch die Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen darstellen kann. Die Oberflächen – außen Rotationsellipsoide (Spheroide), innen ein einschaliges (durchgezogene Linie) oder zweischaliges (gestrichelt) Rotationshyperboloid – werden an den bezeichneten Stellen $(t-d)$ glatt angepaßt. Die Parameter werden im Text erklärt. (Bei der gestrichelten Form mit Nasen ist der Übergang zwischen den Flächen in der Zeichnung nicht stetig)

Gegenüber der üblichen Methode, die Oberfläche der Kerne nach Legendre Polynomen zu entwickeln, bietet diese Parametrisierung die Vorteile, daß auch stark deformierte Formen des Systems aus zwei

Kernen ohne eine unhandlich große Zahl von Termen dargestellt werden können, und daß der Übergang von zwei getrennten Kernen bis zum Compoundkern kontinuierlich beschrieben werden kann.

In Zylinderkoordinaten (ϱ, z, φ) läßt sich die Oberfläche eines symmetrischen Systems beschreiben durch (vergleiche Abb. 21)

$$\begin{aligned} \varrho^2 &= a^2 - pz^2 & |z| < t - d \\ \varrho^2 &= b^2 - q(z - t)^2 & t - d < |z| < t + c \end{aligned} \quad (3.18)$$

Dabei ist t der Abstand des Mittelpunkts der äußeren Spheroiden vom Massenschwerpunkt des Gesamtsystems, c deren Symmetriehalbachse, d der Abstand des Anpassungspunkts der Flächen zum Mittelpunkt des Spheroids, a^2 und b^2 sind die Quadrate der Nichtsymmetriehalbachsen und p und q deren Verhältnis zu den Quadraten der entsprechenden Symmetriehalbachsen. Insgesamt sind 6 Parameter (z.B. t, c, d, a, b, p) zur Beschreibung der Form nötig, von denen sich 2 durch die Anschlußbedingungen - glatter Übergang zwischen den Flächen - und einer auf Grund der Volumenerhaltung eliminieren lassen. Die Beziehungen zwischen den Parametern sind im Detail in Anhang B erläutert.

Es ist nicht sinnvoll, als dynamische Variable direkt diese Parameter zu verwenden. Vielmehr verwenden wir als zwei physikalische Variable die beiden ersten Momente der der Massenverteilung :

$$r = \frac{2}{\bar{V}} \int_{z>0} z \varrho^2(z) dz$$

$$s^2 = \frac{5}{\bar{V}} \int_{z>0} \left(z - \frac{r}{2}\right)^2 \varrho^2(z) dz - R = 5 \left[\frac{1}{\bar{V}} \int_{z>0} z^2 \varrho^2(z) dz - \frac{r^2}{4} \right] - R$$

$$\text{mit } \bar{V} = \int_{z>0} \varrho^2(z) dz$$

r ist der Schwerpunktsabstand der beiden Kerne und s als quadratische Abweichung des z Erwartungswerts der Massenverteilung ein Maß für die Deformation. $\bar{V}$ ist proportional zum Volumen eines Kernes. Die

Skalierung von s ist wieder so gewählt, das $s = 0$ sphärischen Kernen entspricht und für deformierte Systeme ohne Hals s die Symmetriehalbachse darstellt. Sie entspricht daher der Größe c des Deformationsmodells (Kap. 3.1).

Der Hals wird durch den Parameter d bestimmt. Er bildet einen dritten Freiheitsgrad. Da auf den uns zur Verfügung stehenden Computern nur zweidimensionale Wellenpaketrechnungen möglich waren, wurde der Halsfreiheitsgrad in zwei Näherungen behandelt.

In der diabatischen Näherung wird angenommen, daß der Halsfreiheitsgrad sehr langsam ist, was bedeutet, daß er überhaupt nicht angeregt wird. Man erhält das Modell zweier Spheroide.

In der adiabatischen Näherung wird der Halsfreiheitsgrad als sehr schnell angenommen, sodaß er sich stets so einstellt, daß die Energie ein Minimum annimmt.

Wir diskutieren im Folgenden beide Modelle. Es ist anzunehmen, daß die adiabatische Behandlung der Wirklichkeit näher kommt, da bei der Bildung des Halses wenig Masse transportiert wird, und daher die Trägheit gering sein sollte.

Setzt man $d = c < t$, so erhält man getrennte Spheroide, mit $d = t < c$ abgeschnittene Spheroide, die an den Schnittflächen zusammenhängen. Wir verwenden diese Formen zur Darstellung deformierter Systeme ohne angeregtem Halsfreiheitsgrad. Wir bezeichnen dies als das Spheroid Modell. Die Potentialfläche ist in Abb. 22 dargestellt. Das Modell entspricht dem Deformationsmodell von Abschnitt 3.4, jedoch verwenden wir hier das exakte, numerisch integrierte KNS Potential. Wie ein Vergleich von Abb. 16 mit Abb. 22 zeigt, ergibt sich trotz qualitativer Ähnlichkeit ein erheblicher quantitativer Unterschied zur Landowne - Nix Näherung. Die exakte Rechnung ergibt einen Sattel bei $r = 12.1$ fm, $s = 1.3$ fm und 96.0 MeV gegenüber $r = 10.1$ fm, $s = 0.36$ fm und 100.1 MeV für die Näherung. Die eindimensionale Barriere bleibt selbstverständlich unverändert.

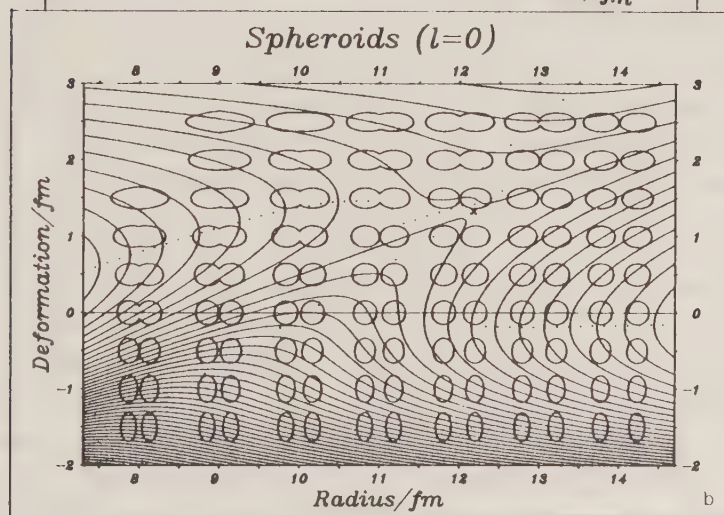
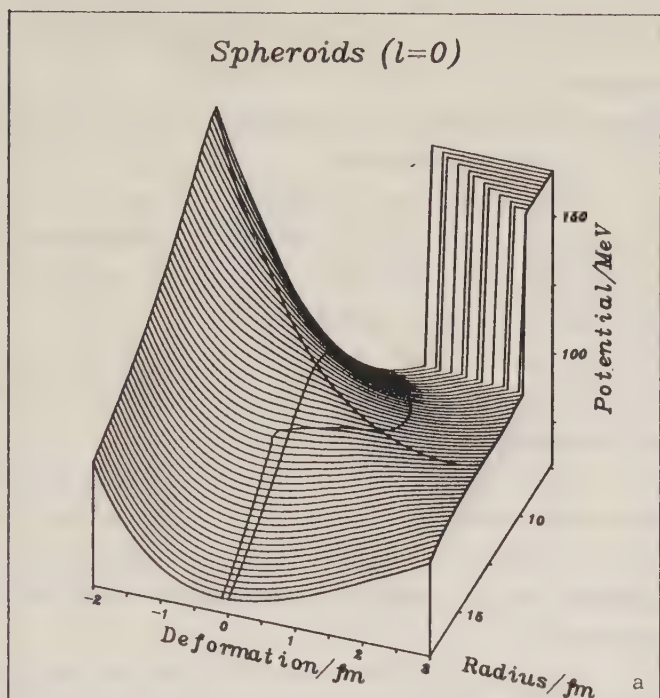


Abb. 22. Die s -Wellen Energiefläche des Spheroidmodells. Im Kontourdiagramm sind die Formen der Kerne dargestellt. Außerdem sind der adiabatische Weg (in Abb.22b gepunktet) und der Ort der Barriere eingezeichnet.

Für die adiabatische Näherung wird die Wechselwirkungsenergie bei vorgegebenem Radius r und Deformation s bezüglich des Halsfreiheitsgrads minimiert.

Wir bezeichnen dieses Potential als 'adiabatisches Hals' Modell. Die Potentialfläche ist in Abb. 23 dargestellt.

Sie zeigt die gleiche Struktur wie das Spheroid Potential, bei einer weiteren Absenkung des Sattels auf 94.4 MeV. Dessen Koordinaten sind $r = 11.9$ fm, $s = 1.2$ fm und $d = 2.60$ fm. Das entspricht einem positiven Halsparameter $a = 4.52$ fm², bzw. Radius von 2.13 fm.

Man erhält also am Sattelpunkt bereits verbundene Kerne. Da das Potential in dieser Parametrisierung auch für zusammenhängende Formen definiert ist, entstehen dadurch keine Probleme.

Jedoch wird nach dem Kontakt der Kerne Bahndrehimpuls in inneren Spin dissipiert werden und sich der Trägheitsparameter für die Radialbewegung ändern. Die Verwendung des einfachen Ausdrucks für das Zentrifugalpotential und der reduzierten Masse kann dann nur noch eine Näherung darstellen.

Abb. 22a/23a zeigen die Potentialflächen der beiden Modelle in dreidimensionaler Darstellung. In Abb. 22a bilden die Flächen konstanten Potentials in Blickrichtung rechts hinten bei kleinen Werten von r und großen positiven Werten von s den Parameterbereich, in dem keine Formen mehr möglich sind. Bei den Höhenliniendiagrammen und in Abb. 23a wurde wieder eine Exponentialfunktion angepaßt.

Bei großen Abständen werden die beiden Potentiale gleich, da dann der kurzreichweitige Halsfreiheitsgrad nicht mehr angeregt werden kann. In Deformationsrichtung ergibt sich asymptotisch eine unsymmetrische Mulde. Prolate Deformationen erfordern weniger Energie als bezüglich des Parameters s betragsmäßig gleiche oblate. Die Krümmung des Potentials im Minimum $V''(c_{ad})$ und damit die Oszillatorkonstante K_{KNS} ist erheblich geringer als der experimentelle Wert $K = 25.9$ Mev/fm² /72/

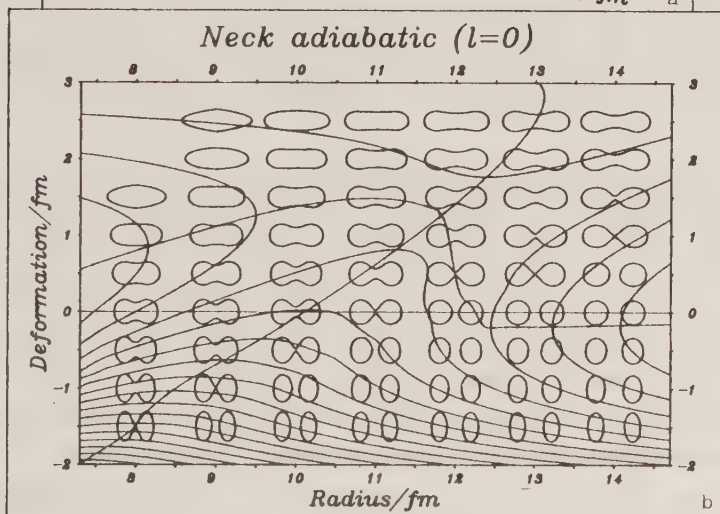
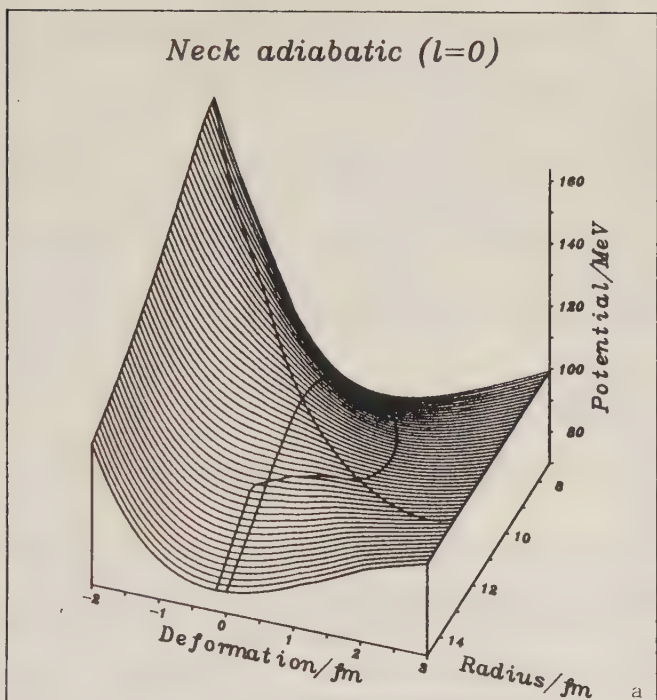


Abb. 23. Die s -Wellen Energiefläche des adiabatischen Hals-Modells mit den Kernformen, dem adiabatische Weg und dem Ort der Barriere.

$$K_{\text{KNS}} = 11.35 \frac{\text{MeV}}{\text{fm}^2}$$

Der Grund dafür ist darin zu suchen, daß die Parameter des KNS - Potentials über das gesamte Periodensystem angepaßt sind. Auf Grund seiner abgeschlossenen Protonen - und fast abgeschlossene Neutronenschale fällt der $^{58}\text{Nickel}$ Kern aus dieser Systematik heraus. Schaleneffekte spielen hier eine wichtige Rolle. Um dennoch die angeregten Niveaus des Kerns richtig beschreiben zu können, passen wir den Trägheitsparameter so an, daß das erste angeregte Niveau des (asymptotischen) KNS Potential die gleiche Energie wie das erste 2^+ Niveau des Nickels hat. Man erhält

$$B = 2.059 \cdot 10^5 \frac{\text{MeV}}{c^2},$$

was weniger als die Hälfte des experimentellen Werts ($4.76 \cdot 10^5 \text{ MeV}/c^2$) ist.

Die resultierenden Fusionsanregungsfunktionen zeigt Abb. 24. Der Abstand zwischen Experiment und eindimensionaler Rechnung vermindert sich jeweils um etwa ein Drittel für jeden der zusätzlichen Freiheitsgrade. Die Ergebnisse für das exakte Spheroid Modell liegen erwartungsgemäß deutlich über denen der Landowneschen Näherung (Abb. 17). Die Kurven nähern sich zunehmend den (gefalteten) experimentellen Ergebnissen. Offensichtlich leistet der Halsfreiheitsgrad einen erheblichen Beitrag zur Fusion.

Die Gültigkeit der adiabatischen Näherung für den Halsfreiheitsgrad ist vermutlich besser, als man zunächst erwarten würde. Wie schon diskutiert wurde sollte er einen relativ kleinen Trägheitsparameter haben, was bedeutet, daß die adiabatische Näherung (sie entspricht verschwindender Trägheit) die wirkliche Bewegung gut beschreibt. Außerdem ist die 'Adiabatizität' nur im Rahmen der Drei - Oberflächen - Parametrisierung definiert. Zum Beispiel liegen in der Nähe des Sattels Formen, bei denen die äußeren Spheroide durch Kegelmäntel verbunden sind (Berührung der Kerne in einem Punkt). Solche Formen sind sicher unphysikalisch, d.h. deren Energie ist höher als in der reale Wert. Man

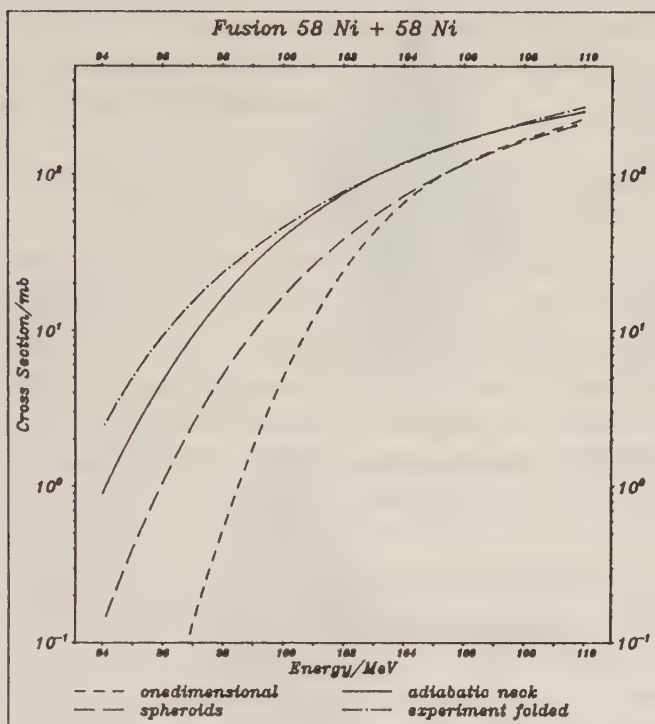


Abb. 24. Wellenpaketwirkungsquerschnitte für das eindimensionale, das Spheroid- und das adiabatische Hals-Modell im Vergleich zu den gefalteten experimentellen Daten. Das KNS-Potential wurde mit dem Parametersatz P-MN (vergleiche Abschnitt 3.1) berechnet.

darf daher erwarten, daß eine Verfeinerung der Parametrisierung zu einer weiteren Absenkung der Barriere bzw. des Sattels führen wird.

Abb. 25 zeigt Bilder der Wellenpakete während des Ablaufs der Reaktion im adiabatischen Halsmodell bei einer Energie von 97 MeV, also etwa zwischen der eindimensionalen Barriere und dem Sattelpunkt. Eingezeichnet sind wieder der eindimensionale Weg und der Ort der Barriere. Qualitativ ist der Ablauf der gleiche wie bei Deformationsmodell Abb. 18.

Beim reflektierten Paket laufen auf der Seite des Sattels zwei fast

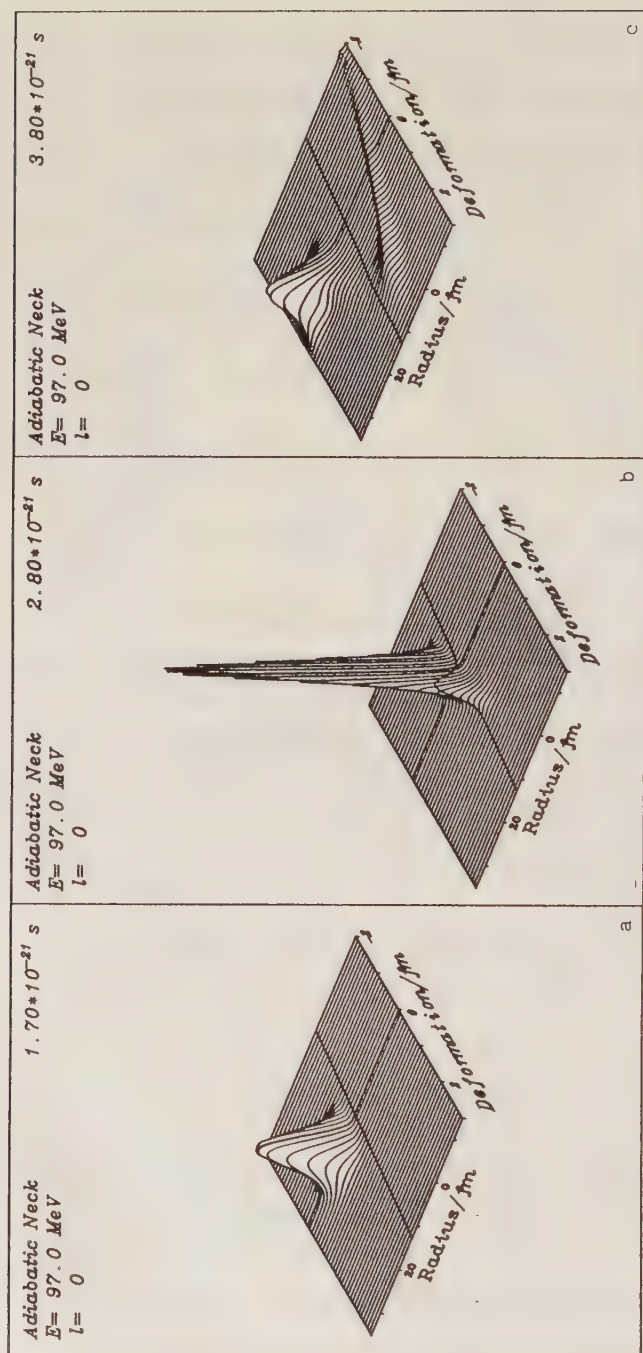


Abb. 25. Das zweidimensionale Wellenpaket während der Bewegung im Potential des adiabatischen Hals Modells vor, beim und nach dem Stoß der Kerne bei einer Energie von 98 MeV und $l = 0$. Die Reaktion verläuft qualitativ ähnlich wie im Deformationsmodell Abb. 20. Die durchgezogene Linie stellt den Ort der Barriere dar.

getrennte Teile nacheinander aus. Die nachfolgende Welle stammen aus zerfallenden Resonanzen im Bereich der Barriere, die sich auch wieder in der großen Länge des transmittierten Teils zeigen.

Um Vergleichbarkeit mit dem Deformationsmodell von Landowne und Nix /33/, das den Ausgangspunkt dieser Arbeit bildete, zu erhalten, wurden alle bisherigen Rechnungen für das Modell der drei quadratischen Oberflächen mit dem in diesem Modell verwendeten Parametersatz $P - MN$ (siehe Kapitel 3.1) durchgeführt. Es zeigt sich jedoch, daß die ursprünglich bestimmten Parameter ($P - KNS$) eine niedrigere Barriere ergeben. In Ref. /4/ wurde dieser Parametersatz zur Berechnung der Fusionsdaten leichter Systeme mit dem eindimensionalen $KNS - Potnetial$ verwendet. Dabei ergab sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen.

Aus diesen Gründen wurden die Fusionsanregungsfunktionen für das System $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ im Spheroid - und adiabatischem Hals - Modell noch einmal mit den ursprünglichen Parametern $P - KNS$ berechnet. Man erhält eine Absenkung der eindimensionalen Barriere um 1.2 MeV auf 100.9 MeV bzw. um 2.2 MeV auf 98.1 MeV und des Sattelpunktes um 0.6 MeV auf 95.4 MeV bzw. um 2.3 MeV auf 92.1 MeV für das Spheroidmodell bzw. das adiabatische Halsmodell. In Abb. 26 sind die Wirkungsquerschnitte für die verschiedenen Modelle dargestellt.

Die Ergebnisse des adiabatischen Halsmodells zeigt nun eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten. Die leichte positive Abweichung bei höheren Energien läßt sich auf die adiabatische Näherung zurückführen. Mit abnehmender Energie wird diese zunehmend besser (vergleiche Ref. /75/), sodaß das Zusammenfallen der Kurven bei niedrigen Energien als Beweis dafür gewertet werden kann, daß die relevanten Freiheitsgrade in unserem Modell enthalten sind. Man kann jedoch nicht ganz ausschließen, daß der Fehler der adiabatischen Näherung gerade den Einfluß der vernachlässigten Freiheitsgrade simuliert. Wie diskutiert sollte dieser Effekt aber nicht allzu groß sein. Ein end-

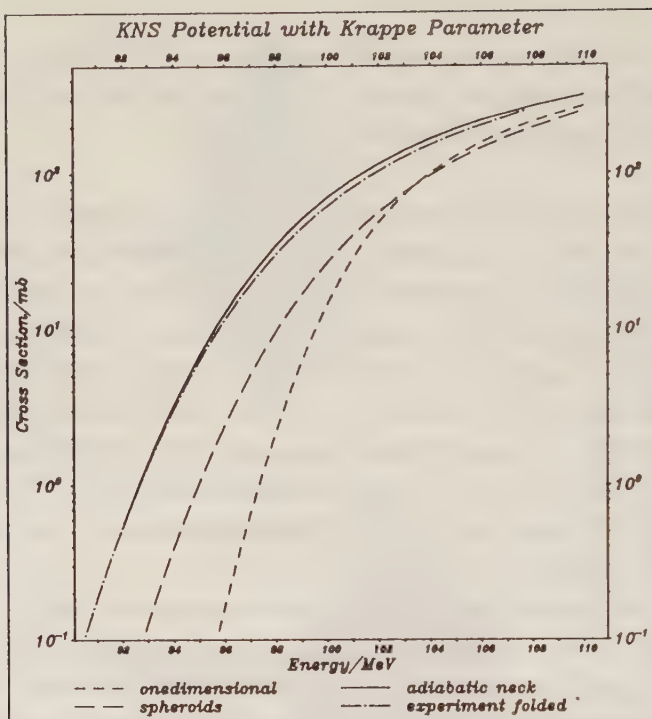


Abb. 26. Wellenpaketwirkungsquerschnitte für das eindimensionale, das Spheroid- und das adiabatische Hals-Modell im Vergleich zu den gefalteten experimentellen Daten. Das KNS-Potential wurde mit dem Parametersatz P-KNS (vergleiche Abschnitt 3.1) berechnet.

gültige Klärung dieser Frage kann nur eine voll dynamische Behandlung des Halsfreiheitsgrads liefern.

3.6 Klassische Grenzwerte

Ein Wellenpaket ist das Analogon zu einem klassischen Teilchen. Für Potenzpotentiale gilt das Ehrenfestsche Theorem /64/, das besagt, daß die Ortserwartungswerte der Wellenfunktion den klassischen Bewegungsgleichungen genügen. Man kann daher erwarten, daß sich die Erwartungswerte unserer Wellenpakete in erster Näherung so verhalten, wie die entsprechenden klassischen Größen. In Abb. 27 ist die Bahnkurve der Kerne

$$(r(t), s(t)) = \langle \Psi_{WP}(t) | (r, s) | \Psi_{WP}(t) \rangle$$

in das Kontourdiagramm der Energiefläche des adiabatischen Hals-Modells eingezeichnet. Dabei ist (r, s) der Operator des Ortsvektors in dem aus Schwerpunktsabstand und Deformation aufgespannten Raum. In diesem Beispiel liegt die Energie (wie bei den Wellenpaketbildern Abb. 25) mit 97 MeV etwa zwischen Sattelpunkt und der eindimensionalen Barriere. Die Breite des Wellenpakets in Deformationsrichtung wird durch die Länge der Striche senkrecht zur Bahnkurve dargestellt. Der Abstand dieser Striche entspricht konstanten Zeitintervallen von 10^{-22} Sekunden. Man kann anhand dieser Kurven deutlich sehen, wie der Schwerpunkt des Wellenpakets beim Einlaufen durch die Coulombabstoßung in Richtung oblater Deformation verschoben wird. Die Trägheit des Systems ist aber so groß, daß der Schwerpunkt nicht ganz dem adiabatischen Weg folgt und schließlich immer noch oblat deformiert gegen die Barriere stößt. Die Reflexion erfolgt ziemlich genau bei einem klassischen Umkehrpunkt ($E = V$). Die Breite des Wellenpakets bleibt bis nahe an die Barriere relativ konstant, Anregungen in Deformationsrichtung treten hauptsächlich während des Auftreffens und danach auf. Das auslaufende Wellenpaket ist dann sehr viel breiter als das einlaufende. Hier trägt vor allem die Breite des Fusionsanteils bei, der die Anregung des Compoundkerns widerspiegelt.

Bemerkenswert ist, daß der überwiegende Teil der Welle das Fusionstal nicht verläßt, die Bahnkurve entspricht qualitativ genau der eines

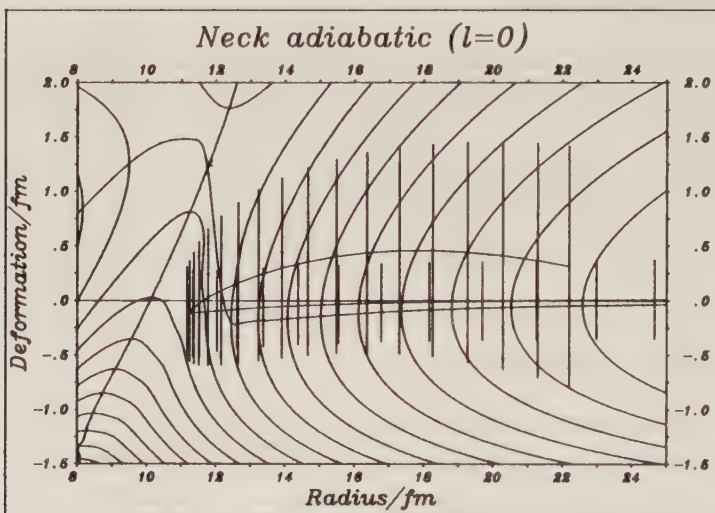


Abb. 27. Bahnkurve des Wellenpakets aus Abb. 25 im adiabatischen Halsmodell. Die Querstriche geben die Breite des Wellenpakets in Deformationsrichtung bei konstanten Zeitabständen von 10^{-22} s an. Die Energie ist 97 MeV, der Drehimpuls ist $\ell=0$.

klassischen Teilchens. Erst nach dem Stoß wechselt die Bahn auf die andere, prolatten Deformationen entsprechenden Seite des Tals.

An der Barriere ist die Breite des Wellenpakets immer noch so gering, daß nur ein kleiner Teil seines 'Schwanzes' in den Bereich des Sattels gelangt, wo er zur Fusion beitragen kann.

4. Drehimpulsverteilungen

Neben dem Studium von Wirkungsquerschnitten gewinnt die Messung von Drehimpulsverteilungen der Compoundkerne bzw. von deren Momenten zunehmend an Bedeutung bei der Untersuchung von Fusionsreaktionen /31,32/. Sie stellen ein zweites unabhängiges experimentelles Ergebnis dar und erlauben eine genauere Untersuchung des Mechanismus von Fusionsreaktionen und der dabei auftretenden Potentiale.

Die Drehimpuls – oder Spinverteilung sind gegeben als die Partialwellen – Wirkungsquerschnitte

$$\sigma_{\ell}(E) = \frac{\pi}{k^2} (2\ell + 1) T_{\ell}(E),$$

wobei T_{ℓ} wieder die Transmission der ℓ – ten Partialwelle bedeutet. Die Momente $\langle \ell^k \rangle$ sind bezüglich dieser auf den totalen Fusionswirkungsquerschnitt σ_f normierten Verteilung definiert

$$\langle \ell^k \rangle = \sum_{\ell} \ell^k \sigma_{\ell} / \sigma_f$$

Diese Drehimpulsverteilungen können je nach Zerfallsmodus des Compoundkerns auf verschiedene Weise gemessen werden. Reaktionen mit einer Gesamtladungszahl unter 60 enden fast ausschließlich bei Verdampfungsrestkernen (evaporation residues). Die Anregungsenergie dieser Fusionsrestkerne liegen über der Schwelle für Teilchenemission, sie gehen daher durch Abdampfen von Nukleonen und nachfolgender γ – Emission in den Grundzustand über. Aus der gemessenen γ – Multiplizität kann man (zumindest im Prinzip) mittels statistischer Modellrechnungen (statistical – evaporation – model) /76/ Drehimpulsverteilungen extrahieren. Die Anisotropie der emittierten Teilchen steht im Zusammenhang mit dem zweiten Moment der Drehimpulsverteilungen $\langle \ell^2 \rangle$ /77/.

Bei höher geladenen Compoundkernen tritt zunehmend die Spaltung in Konkurrenz zur Nukleonenabdampfung, ab einer Ladung von $Z \approx 90$ dominiert sie fast vollkommen.

Im Übergangszustands - (transition state) Modell läßt sich die Winkelverteilung $W(\theta)$ der Spaltprodukte in deren Schwerpunktsystem bezüglich der Strahlachse aus der Verteilung der Spinprojektionen K mit der Breite K_0 berechnen /54/.

$$W(\theta) = \frac{\pi \hbar^2}{2\mu E} \sum_{\ell} (2\ell + 1) T_{\ell} \sum_{K=-\ell}^{\ell} |Y_{\ell K}(\theta, 0)|^2 e^{-K^2/K_0^2} / \sum_{K=-\ell}^{\ell} e^{-K^2/K_0^2}$$

Der Erwartungswert $\langle \ell^2 \rangle$ hängt dann mit der Asymmetrie zusammen

$$W(\pi)/W(\pi/2) = 1 + \langle \ell^2 \rangle / 4K_0^2$$

Messungen ergeben allgemein eine Verbreiterung der Spinverteilungen gegenüber den Erwartungen aus dem eindimensionalen Modell. Auch aus theoretischen Modellen mit zusätzlichen Freiheitsgraden erhält man breitere Verteilungen /24,57,77 - 79/.

In Abb. 28 sind die Drehimpulsverteilungen der verschiedenen Potentialmodelle für einige Energien um die Barriere aufgetragen. Bei allen Energien steigt die Breite der Verteilungen mit der Anzahl der Freiheitsgrade und die Maxima verschieben sich zu höheren Drehimpulsen. Dieser Effekt ergibt sich aus demselben Grund wie die Erhöhung des gesamten Wirkungsquerschnitts unterhalb der Barriere: die Wellenpakete folgen bei größerem Zentrifugalpotential zunehmend dem adiabatischen Weg, wodurch die Transmission höherer Partialwellen gegenüber dem eindimensionalen Weg ansteigt.

Bei niedriger Energie folgen auch die Größen der Wirkungsquerschnitte diesem Trend. Dies entspricht dem Ergebnis, daß der Subbarrierenwirkungsquerschnitt durch zusätzliche Freiheitsgrade erhöht wird.

Bei Energien um und über der Barriere verschiebt sich das Verhältnis der Wirkungsquerschnitte. Bei 102 MeV (was etwa dem Wert der

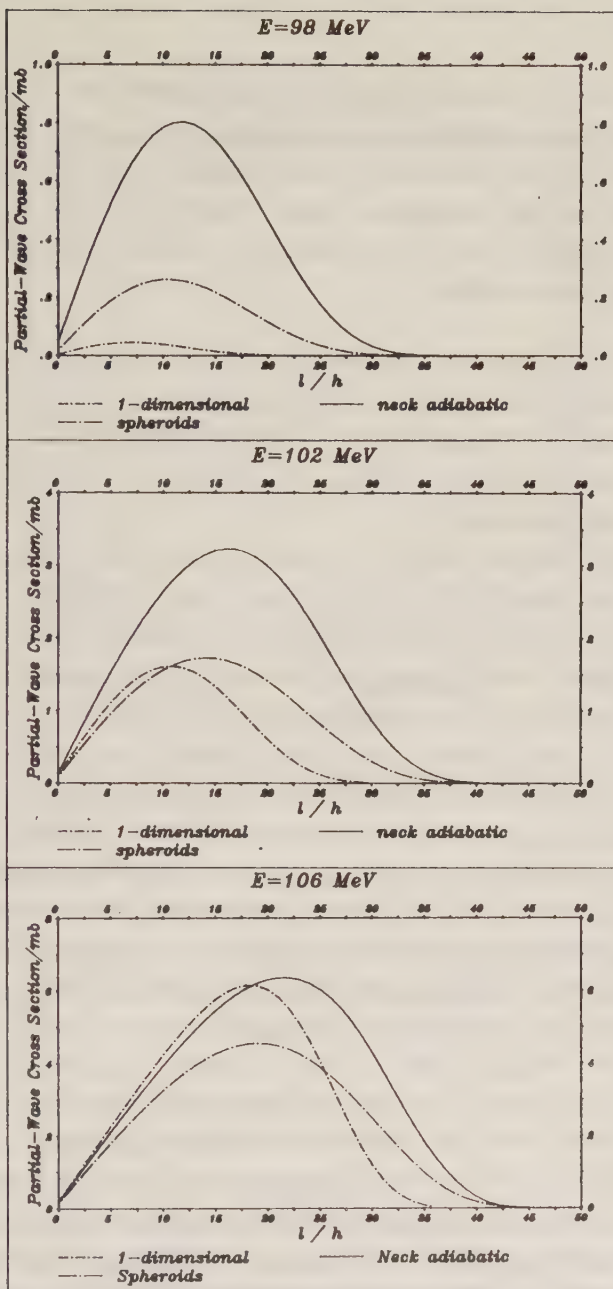


Abb. 28. Wellenpaketpartialwellenwirkungsquerschnitte im eindimensionalen, Spheroid- und adiabatischen Hals-Modell für Energien unter- bzw. oberhalb und an der eindimensionalen Barriere, die eine Höhe von etwa 102 MeV hat.

eindimensionalen Barriere entspricht) hat das Maximum der 1 – dimensionalen Drehimpulsverteilung die gleiche Höhe wie im Spheroidmodell; bei 110 MeV wie im adiabatischen Hals Modell. Parallel dazu nähern sich die Kurven der mehrdimensionalen Modelle einander an. Die Modelle unterscheiden sich ja im wesentlichen durch die um ca. 2 MeV verschiedenen Barrierenhöhen.

Das Ansteigen des eindimensionalen gegenüber den mehrdimensionalen Wirkungsquerschnitten oberhalb der Barriere bestätigt die Erkenntnis aus dem CC – Modell (Abschnitt 1.2.3), daß Kanalkopplung die Transmission oberhalb der Barriere reduziert. Im Wellenpaketbild läßt sich das folgendermaßen verstehen:

Bei niedrigen Energien folgt das Wellenpaket mehr dem adiabatischen Weg und sieht daher eine im Mittel reduzierte Barriere. Bei hohen Energien (d.h. Geschwindigkeiten) kann es diesem Weg immer schlechter folgen, es läuft immer mehr als durch die Coulombabstoßung noch oblat deformiertes Wellenpaket gegen die Barriere. Es sieht daher eine gegenüber dem geraden Weg erhöhte Barriere und eine grössere Steigung des Potentials, was klassisch einer größeren Kraft entspricht und was die Transmission über der Barriere wesentlich bestimmt.

Oberhalb der Barriere unterscheiden sich die totalen Fusionswirkungsquerschnitte nur wenig. Es ist interessant zu sehen, wie diese sich aus sehr unterschiedlich verlaufenden Partialwellenwirkungsquerschnitten zusammensetzen. Die Reduzierung des Maximums durch die Kopplung wird durch die Verbreiterung der Verteilung kompensiert.

In Abb. 29 sind noch die normierten Spinverteilungen σ_l/σ_f für das adiabatische Hals Modell bei verschiedenen Energien aufgetragen.

Abb. 30 zeigt zum Vergleich die Ergebnisse aus einer CC – Rechnung /57/. Im Gegensatz zu unseren Wellenpaketrechnungen handelt es sich um stationäre Rechnungen. Es können also nur qualitative Vergleiche angestellt werden. Es zeigt sich eine weitgehende Übereinstimmung der auftretenden Effekte – Verbreiterung der Verteilung und Änderung des

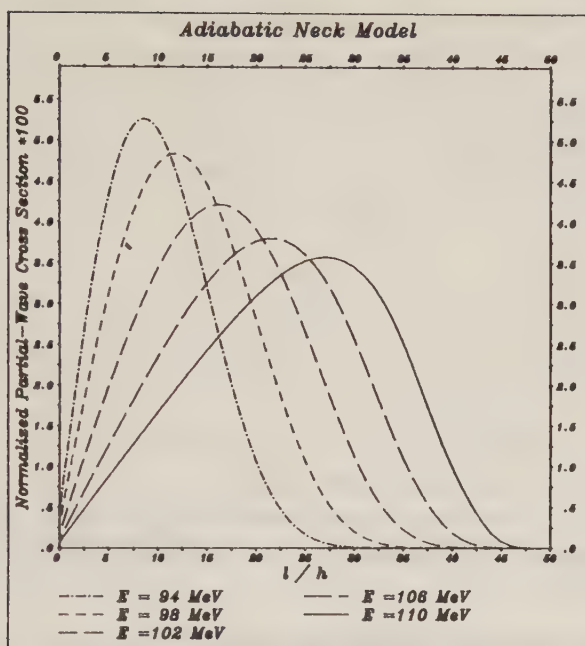


Abb. 29. Normierte Partialwellenwirkungsquerschnitte im adiabatischen Hals-Modell bei verschiedenen Energien.

Verhältnis der Maxima.

Die Wellenpaketergebnisse zeigen jedoch nicht die 'Beulen' der CC-Kurven. Diese entstehen beim Aufsummieren der Beiträge der (wenigen) gekoppelten Kanäle. Dem Wellenpaketalgorithmus entspricht eine (fast) vollständige Entwicklung nach den Eigenfunktionen des entsprechenden Freiheitsgrads. Dabei ergibt sich wieder ein glatter Verlauf der Kurven. Es ist nicht zu erwarten, daß die Hinzunahme weiterer Freiheitsgrade daran etwas ändern würde.

Abb. 31a/b zeigt die Erwartungswerte $\langle l \rangle$ bzw. $\langle l^2 \rangle$ der verschiedenen Modelle als Funktion der Energie. Zum Vergleich sind auch die eindimensionalen stationäre Ergebnisse (strichpunktiert) eingezeichnet. Durch die Energieunschärfe verlieren die Wellenpaketergebnisse sehr an Struktur.

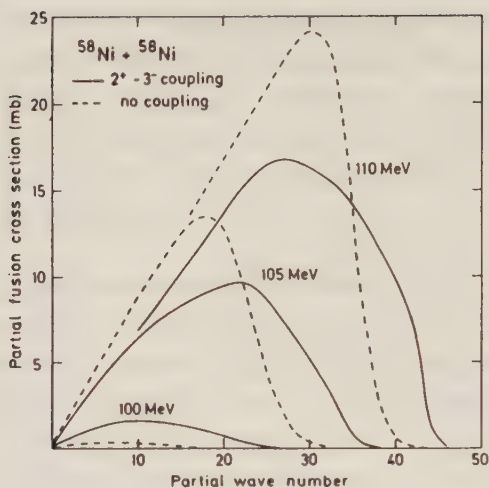


Abb. 30. Stationäre Partialwellenwirkungsquerschnitte für das System mit Kopplung an inelastische Kanäle (durchgezogene Linie) bzw. ohne Kopplung (gestrichelt) aus Ref. /57/.

Die Drehimpulserwartungswerte $\langle l \rangle$ und $\langle l^2 \rangle$ zeigen für Energien oberhalb der Barriere einen fast linearen Verlauf, unterhalb flacht die Steigung ab, es deutet sich eine Sättigung an, wie sie für exponentiell mit der Energie abfallende Wirkungsquerschnitte auch theoretisch erwartet wird /77/.

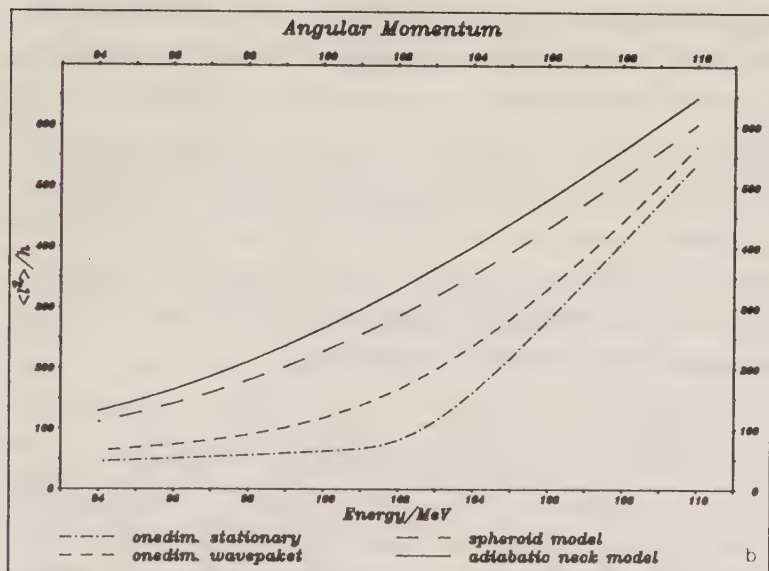
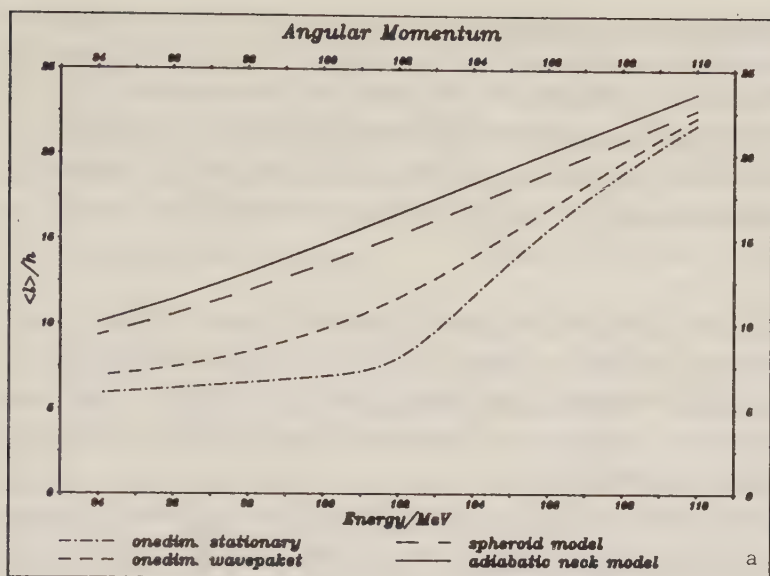


Abb. 31. Drehimpulserwartungswerte $\langle l \rangle$ und $\langle l^2 \rangle$ für die verschiedenen Modelle mit unterschiedlicher Zahl berücksichtigter Freiheitsgrade als Funktion der Energie.

5. Zusammenfassender Ausblick

Im Rahmen des kollektiven Modells wurde die Fusion schwerer Ionen unter Berücksichtigung mehrerer Freiheitsgrade untersucht. Fusionsreaktionen werden beschrieben als Tunneln durch eine mehrdimensionale Potentialbarriere, die sich als Summe der anziehenden Kern- und der abstoßenden Coulombkraft ergibt.

Das Tunneln durch die Barriere wird mittels der Zeitentwicklung von Wellenpaketen berechnet. Dieses Verfahren bildet den ablaufenden physikalischen Prozess nach, bei dem sich ein als Wellenpaket lokalisierendes Projektil im Potential des Targets bewegt. Dazu lösen wir eine zeitabhängige Schrödingergleichung.

Das numerische Verfahren von Goldberg, Schey und Schwarz zur Lösung der zeitabhängigen Schrödingergleichung wurde so weit bezüglich der Fehler, die sich aus der Diskretisierung in Zeit und Raum ergeben, verbessert, daß es möglich wurde, auch mehrdimensional quantitativ brauchbare Ergebnisse mit vertretbarem Rechenaufwand zu erhalten.

Durch die Möglichkeit Bilder bzw. Filme von der Bewegung des Systems zu machen erhält man sehr anschaulich Einblick in das physikalische Geschehen. Anregungen der Kerne werden zum Beispiel als Deformationen des Wellenpakets sichtbar gemacht. Solche Darstellungen sind gut geeignet als didaktisches Hilfsmittel, um das Verständnis von quantenmechanischen Vorgängen zu verbessern.

Der Wellenpaketalgorithmus bietet eine einfach zu handhabende Methode, Eigenschaften komplexer Potentialflächen zu untersuchen. Im Gegensatz zum üblicherweise benutzten Formalismus der gekoppelten Kanäle ist es nicht notwendig, eine endliche Entwicklung nach einem vollständigen Funktionensystem vorzunehmen. Man kann unmittelbar mit dem analytisch oder numerisch vorgegebenem Potential arbeiten. Das ist besonders dann von Vorteil, wenn man Freiheitsgrade des

Systems zweier Kerne bei geringem Abstand untersucht, die sich nur unbefriedigend nach den Eigenmoden der freien Kerne entwickeln lassen.

Die Verwendung von gekoppelten Kanälen ist zusätzlich möglich /36/. Rechnungen mit gekoppelten mehrdimensionalen Wellenpaketen würden z.B. die Behandlung von zusätzlichen Transfer – Reaktionen zwischen den deformierten Kernen erlauben.

Die Darstellung eines Zustands als Wellenpaket in einem Potential erlaubt es, die relevanten angeregten Zustände eines Freiheitsgrads einzubeziehen. Es treten keine zusätzlichen numerischen Probleme mit wachsender Zahl verwendeter Punkte auf. Die Punktzahl bestimmt die Ortsschrittweite und damit die Anzahl der effektiv eingeschlossenen Kanäle. Der numerische Aufwand des Zeitentwicklungsalgorithmus wächst nur linear mit der Punktzahl und nicht quadratisch oder stärker wie beim CC – Verfahren mit der Kanalzahl. Der numerische Aufwand für die Zeitentwicklung von mehrdimensionalen Wellenpaketen ist allerdings beträchtlich, sowohl bezüglich der Anforderungen an Rechenzeit wie an Speicherplatz. Daher konnten nur zweidimensionale Rechnungen durchgeführt werden. Die rasche Entwicklung von immer leistungsfähigeren Rechnern läßt jedoch hoffen, in naher Zukunft auch höherdimensionale Probleme behandeln zu können.

Die durch die Rechenkapazitäten bedingte Beschränkung auf Wellenpakete, die in radialer Richtung eine endliche (und zudem relativ geringe) Ausdehnung haben und deren Energieunschärfe deshalb nicht vernachlässigbar ist, führt dazu, daß alle Ergebnisse mit der Energieverteilung des Wellenpakets gefaltet erscheinen. Um Vergleiche mit dem Experiment oder stationären Rechnungen ziehen zu können, müssen diese Ergebnisse ebenfalls gefaltet werden.

Wellenpakete sind das quantenmechanische Analogon zu freien klassischen Teilchen. Ihre Erwartungswerte bezüglich bestimmter Operatoren

korrespondieren zu den entsprechenden klassischen Größen. In der Schwerionenphysik werden häufig semiklassische Näherungen benutzt. Wir haben an einem Modell für Kerne mit Quadrupoldeformationen eine zweidimensionale semiklassische Näherung im Vergleich mit dem quantenmechanisch exakten Wellenpaketalgorithmus überprüft, und fanden erhebliche Unterschiede.

Als Beispiel für die Fusion schwerer Kerne wurde die Reaktion $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni} \rightarrow ^{116}\text{Ba}$ im Detail untersucht. Neben dem Schwerpunktsabstand der Kerne wurden als weitere Freiheitsgrade spheriodale Deformationen (bzw. die 2^+ Quadrupoldeformation) sowie die Ausbildung eines Halses zwischen den Kernen berücksichtigt.

Im einfachsten Modell wird die Deformationsabhängigkeit der Energie der freien Kerne durch den harmonischen Oszillator des Vibrationsmodells dargestellt. Die Coulombwechselwirkung erfolgt durch das Quadrupolfeld der deformierten Kerne, die Änderung der Kernpotentials wird mit Hilfe des Proximity Theorems approximiert. Wir finden für dieses Modell jedoch nur eine kleine Anhebung des Fusionswirkungsquerschnitts gegenüber dem eindimensionalen Fall.

Um die Deformationen genauer und zusätzlich die Ausbildung eines Halses behandeln zu können, verwendeten wir eine Parametrisierung der Kernoberflächen, in welcher die Formen des Zwei - Kern Systems durch drei stetig aneinandergefügte Rotationsflächen zweiter Ordnung dargestellt werden. In dieser Parametrisierung finden wir, daß der Deformationsfreiheitsgrad einen wesentlich größeren Beitrag zur Fusion liefert.

Die Hinzunahme des in adiabatischer Näherung behandelten Halsfreiheitsgrads bringt eine weitere, deutliche Erhöhung der Fusion. Wir erhalten besonders bei niedrigen Energien eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Die Behandlung des Halsfreiheitsgrads in adiabatischer Näherung stellt zwar eine obere Grenze der Fusion in diesem Modell dar, sie sollte jedoch (gerade bei niedrigen Energien) eine gute Näherung sein.

Es zeigt sich, daß für die Vergrößerung des Fusionswirkungsquerschnitts unterhalb der Barriere die Schwingungsanregung der Kerne entscheidend ist. Sie sorgt dafür, daß genügend Wahrscheinlichkeit dafür besteht, daß Fluß über den Fusionssattelpunkt treten kann. Die Dynamik der Bewegung bewirkt wegen der Coulombabstoßung eine Reduzierung der Transmission, die aber bei Energien unterhalb der Barriere zunehmend schwächer wird.

Berücksichtigt man die geringe Zahl von betrachteten Freiheitsgraden, so ist die Tatsache bemerkenswert, daß die experimentellen Daten gut reproduziert werden. Offensichtlich sind die relevanten Deformationsfreiheitsgrade in diesem Modell enthalten. In Coupled Channel Rechnungen tragen höhere Multipolaritäten wie 3^- und 4^+ Vibrationen ebenfalls erheblich zur Fusion bei. Man kann schließen, daß diese bereits zum großen Teil in der Hals-Parametrisierung eingeschlossen sind. Man kann jedoch nicht ausschließen, daß sich die Effekte der adabatischen Näherung (zu große Erhöhung des Wirkungsquerschnitts) mit dem Einfluß vernachlässigter Freiheitsgrade kompensieren. Diese Frage kann nur eine dynamische Berechnung des Halsfreiheitsgrads entscheiden.

Das System $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ ist eben noch stabil gegen asymmetrischen Massenfluß. Virtuelle Anregungen dieses Freiheitsgrads könnten daher den Wirkungsquerschnitt noch weiter erhöhen. Explizite Transferreaktionen sollten nicht notwendig sein.

Für das System $^{58}\text{Ni} + ^{58}\text{Ni}$ finden wir, daß spheriodale Deformationen und Halsbildung die wesentlichen Freiheitsgrade für die Fusion sind. Interessant wäre nun die Anwendung dieses Modells auf andere Systeme und die Frage, inwieweit andere Freiheitsgrade, wie nicht symmetrische Deformationen und Massenaustausch nach dem Kontakt der Kerne eine Rolle spielen. Isotopische Effekte können in unserer kollektiven Beschreibung der Kernformen und Wechselwirkungen nicht enthalten sein. Mit einer anderen Darstellung der Wechselwirkung, z.B. im 2-Zentren-Schalenmodell ließen sich – bei geeigneter Beschränkung der Zahl der Freiheitsgrade – auch solche Effekte mit dem Wellenpaketalgorithmus

untersuchen.

Anhang A : Numerische Verfahren

A.1 Der Numerov Algorithmus

Bei der numerischen Integration von Differentialgleichungen wird die gesuchte Funktion an diskreten Stützstellen berechnet. Die Ableitungen der diskretisierten Funktion können dabei durch die Ableitung des Interpolationspolynoms durch n benachbarte Punkte approximiert werden /81/. Zur Lösung der Schrödingergleichung benötigen wir die zweite Ableitung der Wellenfunktion bei äquidistanten Stützstellen mit Schrittweite ϵ .

$$f_j = f(x_j) = f(x_0 + j\epsilon)$$

Definiert man den Operator δ^2 durch

$$\delta^2 f_j = f_{j+1} - 2f_j + f_{j-1}$$

so läßt sich die 2. Ableitung darstellen als /81/

$$\frac{d^2}{dx^2} f(x_j) \rightarrow \delta^2 \frac{1}{\epsilon^2} \left(1 - \frac{\delta^2}{12}\right) f_j + O(\epsilon^6) \quad (A1)$$

Die verallgemeinerte Schrödingergleichung ist von der Form

$$\frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + f(x) \Psi(x) = g(x)$$

Im CC - Formalismus ist f eine Matrix, Ψ und g sind Vektoren jeweils von der Dimension der Kanalzahl.

Nach Diskretisierung, Einsetzen von (A1) und Multiplikation von links mit $\epsilon^2(1 + \delta^2/12)$ erhalten wir

$$\delta^2 \left(1 + \frac{\delta^2}{12}\right) \left(1 - \frac{\delta^2}{12}\right) Y_j + \epsilon^2 \left(1 + \frac{\delta^2}{12}\right) f_j \Psi_j = \epsilon^2 \left(1 + \frac{\delta^2}{12}\right) g_j$$

Der Produktterm ist von der Ordnung δ^6 und kann vernachlässigt werden. Einsetzen des Operators δ^2 liefert

$$\left(1 + \frac{\epsilon^2}{12} f_{j+1}\right) \psi_{j+1} - \left(2 - 10 \frac{\epsilon^2}{12} f_j\right) \psi_j + \left(1 + \frac{\epsilon^2}{12} f_{j-1}\right) \psi_{j-1} = \frac{\epsilon^2}{12} (g_{j+1} + 10g_j + g_{j-1}) \quad (\text{A2})$$

oder mit $y_j = \left(1 + \frac{\epsilon^2}{12} f_{j+1}\right) \psi_j$

$$y_{j+1} - \left(2 - \frac{\epsilon^2 f_j}{1 + \epsilon^2 f_j/12}\right) y_j + y_{j+1} = \frac{\epsilon^2}{12} (g_{j+1} + 10g_j + g_{j-1}) \quad (\text{A3})$$

Der Klammerausdruck auf der linken Seite lässt sich durch Entwicklung des Nenners (ohne Verlust an Genauigkeit) weiter vereinfachen

$$2 - \frac{\epsilon^2 f_j}{1 + \epsilon^2 f_j/12} = 3 \left(1 - \frac{\epsilon^2}{6} f_j\right)^2 - 1 + O(\epsilon^6)$$

Damit kann man bei CC - Gleichungen die mit dem ursprünglichen Ausdruck notwendige Matrixinvertierung vermeiden.

A.2 Lösungsmethoden für Schrödingergleichungen

Beschränkt man sich auf ein endliches Ortsintervall $[x_0, x_1]$ so ist die stationäre Streugleichung ein Anfangswertproblem mit vorgegebenen Werten ψ_0 und ψ_1 (z.B. der Ingoing Wave). (A3) stellt dann eine Rekursionsformel zur Berechnung der gesamten Wellenfunktion aus zwei Anfangswerten dar.

Die Zeitentwicklungsgleichung (2.24) führt dagegen auf ein Randwertproblem mit vorgegebenen $\psi_0(t+\delta)$ und $\psi_N(t+\delta)$. (A2) ist dann ein tridiagonales Gleichungssystem. Es ist diagonal dominant und kann daher durch Gaußelimination ohne Pivotsuche gelöst werden. Die Gleichung für einen eindimensionalen Zeitschritt eines Teilchens der Masse m in einem Potential $V(x)$ ist (Gl. 2.24):

$$\frac{d^2}{dx^2} \chi(x) + \frac{m}{\hbar^2} \left[4i \frac{\hbar}{\delta} - V(x) \right] \chi(x) = 4i \frac{m}{\hbar \delta} \psi(x, t)$$

$$\psi(x, t + \delta) = 2\chi(x) - \psi(x, t)$$

oder diskretisiert mit den Abkürzungen

$$\varphi_j = 1 + i\gamma - \frac{\delta}{4\hbar} \gamma V_j$$

$$\Phi_j = \gamma(\Psi_{j+1} + 10\Psi_j + \Psi_{j-1})$$

$$\gamma = \frac{m\varepsilon^2}{3\hbar\delta}$$

ergibt sich

$$\varphi_{j+1}\chi_{j+1} + (10\varphi_j - 12)\chi_j + \varphi_{j-1}\chi_{j-1} = i\Phi_j \quad (\text{A4})$$

Führt man Hilfsvektoren e_j und f_j ein, so läßt sich das Gleichungssystems durch folgende Rekursion lösen /82/ :

$$e_0 = 0 \quad (\text{A5})$$

$$f_0 = \chi_0 = \frac{1}{2} [\Psi_0(t) + \Psi_0(t + \delta)]$$

$$e_j = \varphi_{j+1} (10\varphi_j - 12 - \varphi_{j-1}e_{j-1})^{-1} \quad j = 1..N$$

$$f_j = (\varphi_j - \varphi_{j-1}f_{j-1}) (10\varphi_j - 12 - \varphi_{j-1}e_{j-1})^{-1} \quad j = 1..N-1$$

$$\chi_{N+1} = \frac{1}{2} [\Psi_{N+1}(t) + \Psi_{N+1}(t + \delta)]$$

$$\chi_{j-1} = f_j - e_j\chi_j \quad j = N..1$$

$$\Psi_j(t + \delta) = 2\chi_j - \Psi_j(t) \quad j = N..1$$

Das Feld e ist (im Gegensatz zu f) nur vom Potential, nicht aber vom Wert der Wellenfunktion abhängig, es ändert sich also im Lauf der Zeitentwicklung nicht.

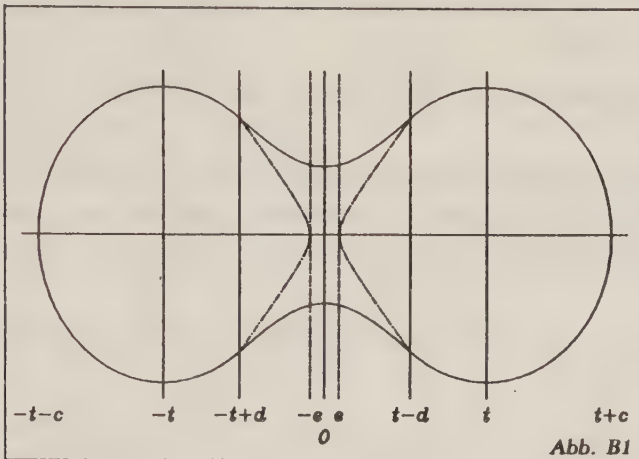
Schließt man das Wellenpaket in einen beweglichen Kasten $[x_0(t), x_N(t)]$ ein, so muß e trotzdem nach jeder Kastenverschiebung neu berechnet werden. Dieser Aufwand läßt sich vermeiden, wenn sich bei jedem Zeitschritt ein Intervall $[x_k(t), x_\ell(t)]$ finden läßt, das das Wellenpaket vollständig einschließt :

$$\Psi(x < x_k(t), t) - \Psi(x > x_\ell(t), t) \equiv 0 \quad (\text{A6})$$

(A6) in (A5) eingesetzt ergibt $f_j = 0$ für $x_j < x_k$. Damit kann (A5) ausschnittsweise im Intervall $[x_k, x_\ell]$ gelöst werden mit den Randbedingungen $f_{k-1} = 0$ und $\chi_{\ell+1} = 0$. Das Feld e muß dann für den gesamten Raumbereich $[x_0, x_N]$, den das Wellenpaket im Lauf der Zeit erreicht, berechnet werden, bleibt aber konstant. Die Werte von Ψ_k und Ψ_ℓ erlauben eine Überprüfung der Bedingung (A6).

Anhang B : Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen

In Abb. B1 werden noch einmal die verwendeten Variablen erläutert.



Die Formen sind in Zylinderkoordinaten (ϱ, φ, z) gegeben durch

$$\begin{aligned} \varrho^2 &= a^2 - pz^2 & z < t-d \\ \varrho^2 &= b^2 - q(z-t)^2 & z > t-d \end{aligned} \quad (\text{B1})$$

Dabei wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit $z > 0$ angenommen, wir beschränken uns damit auf einen (Teil-) Kern.

Implizit lassen sich die Gleichungen schreiben als :

$$\frac{\varrho^2}{a^2} + \frac{z^2}{e^2} = 1 \quad \text{mit } e^2 = a^2/p$$

$$\frac{\varrho^2}{b^2} + \frac{(z-t)^2}{c^2} = 1 \quad \text{mit } c^2 = b^2/q$$

c und e (e kann imaginär werden) sind die jeweiligen Symmetrie-halbachsen.

Als unabhängige Parameter verwenden wir die Größen t, c und d . Die Bedingung, daß die äußeren Formen Spheroide sind, nicht gänzlich auf der negativen z -Achse liegen dürfen, und die Anpaßstelle nicht außer-

halb liegen darf, führt auf folgende Bedingungen :

$$c > 0 \text{ und reell}$$

$$c > -t$$

$$-c \leq d \leq \min(c, t)$$

Man beachte, daß $t < 0$ sein darf, von den Spheroiden tragen dann nur Kappen bei.

Folgende Tabelle zeigt die möglichen Halsformen in Abhängigkeit von den Parametern a und p , das sich ergebende Vorzeichen von e und die Funktionen für den Radius, dabei sei $\alpha = |a^2|$, $\pi = |p|$

a^2	> 0			≤ 0	
p	< 0	$= 0$	> 0	> 0	≤ 0
e^2	< 0	∞	> 0	> 0	≤ 0
q^2	$\alpha - \pi z^2$	α	$\alpha + \pi z^2$	$-\alpha + \pi z^2$	$-\alpha - \pi z^2$
Form					keine

An der Verbindungsstelle der Flächen fordern wir die Stetigkeit des Radius und seiner Ableitung bei $z = t - d$

$$q^2 (t - d) = a^2 - p(t - d)^2 = b^2 - qd^2 \quad (B2)$$

$$q q' (t - d) = p(t - d) = qd$$

Mittels der Anschlußbedingung (B2) lassen sich bis auf eine (es ist bequem dafür q zu verwenden) alle abhängigen Variablen durch die unabhängigen ausdrücken :

$$b^2 = qc^2 \quad (B3)$$

$$a^2 = q(c^2 - td)$$

$$p = qd/(d - t)$$

$$e^2 = (d - t)(c^2 - td)/d$$

Für $a^2 > 0$ hängen die Kerne zusammen, a ist dann der Halsradius

$\varrho(z=0)$, andernfalls sind sie getrennt. Aus der 2. Gleichung von (B3) sieht man, daß das Vorzeichen von a^2 mit dem des Ausdrucks $c^2 - td$ übereinstimmt ($q = b^2/c^2$ ist stets positiv). Die Größe

$$\begin{aligned} e_i &= e - [(d-t)(c^2 - td)]^{1/2} && \text{für } c^2 > td \\ e_i &= 0 && \text{für } c^2 < td \end{aligned}$$

ist damit der linke Rand des Kerns.

Zur Berechnung des Volumens (das konstant gehalten werden soll) und der physikalischen Parameter r und s benötigen wir die Momente der Massenverteilung :

$$\begin{aligned} M_i = \int_{\text{Form}, z > 0} z^i \varrho^2(z) dz &= \int_{e_i}^{t-d} z^i (a - pz^2) dz + \int_{t-d}^{t+c} z^i [b - q(z-t)^2] dz \\ &= q \frac{2i!}{(i+3)!} \left\{ t(t-d)^{i+2} + [(i+2)c-t](t+c)^{i+2} + (i+2)(td-c^2)e_i^{i+1} \right\} \end{aligned} \quad (B4)$$

Die letzte Zeile ergibt sich nach etwas länglicher Rechnung, wenn man nach der Integration die Größen a^2, b^2 und p nach (B3) durch q ersetzt. Das Ergebnis wurde mit dem Programm Reduce /83/ zur analytischen Formelmanipulation verifiziert.

Die Variable q läßt sich wegen der Bedingung des konstanten Kernvolumens eliminieren

$$\pi M_0 = \frac{3}{4\pi} V_1 = A r_0^3, \quad ,$$

dabei ist A die Masse eines der fusionierenden Kerne.

Die physikalischen Koordinaten für symmetrische Systeme $\varrho(z) = \varrho(-z)$ ergeben sich aus den Momenten

$$\begin{aligned} r &= 2M_1/M_0 \\ \sigma &= 2(M_2/M_0 - r^2/4)^{1/2} \end{aligned} \quad (B5)$$

Bei getrennten Kernen ist r der Schwerpunktsabstand. σ ist ein Maß für die Deformation der Kerne. Bei getrennten Spheroiden ist σ proportional zu deren Symmetriehalbachse s

$$s = \sqrt{5}\sigma/2$$

Für vorgegebene Werte von r, s und d stellt (B5) ein nichtlineares Gleichungssystem zur Bestimmung von t und c dar. Abb. B2 zeigt es in der Form $(r, s) = f(t, c)$. Die Größe δ wurde in den Rechnungen so definiert, daß gilt $0 \leq \delta \leq 1$ wobei $\delta = 0/1$ dem minimal/maximal möglichen Wert von d entspricht. $\delta = 1$ stellt dann Spheroide dar.

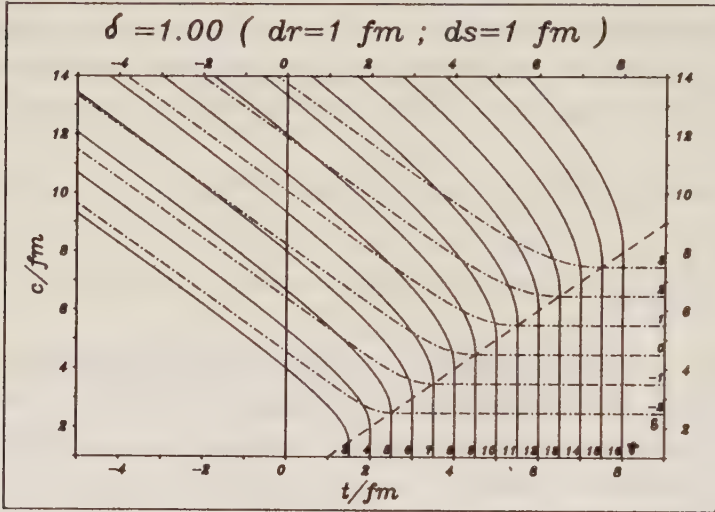


Abb. B2. Abhängigkeit der physikalischen Koordinaten r, s von den Formparametern t, c der Parametrisierung mit drei quadratischen Oberflächen. Der dritte Parameter (d bzw. δ) ist so gewählt, daß sich die Formen des Spheroidmodells ergeben, d.h. zwei (evtl. abgeschnittene und an den Schnittstellen zusammengesetzte) Spheroide ohne Hals.

Für große t gilt $r \rightarrow 2t$ und $s \rightarrow 2c$ wenn $c \rightarrow 0$. Im 2. Quadranten ($t < 0$, $c > 0$) gehen die Linien $r, s = \text{const}$ in parallele Geraden über, die durch $c = c_0(r/s) - t$ gegeben sind. Man sieht daran, daß sich nicht alle Linien $r = \text{const}$ und $s = \text{const}$ schneiden, es gibt also nicht für alle Wertepaare (r, s) Lösungen des Gleichungssystems (B5). Physikalisch bedeutet das, daß bei kleinem Schwerpunktsabstand r nur Deformationen bis zu einem Maximalwert s_{max} auftreten können. Die Momente sind nicht völlig

unabhängig voneinander. Eine Grenzwertbetrachtung von Gleichung (B5) ergibt (näherungsweise)

$$s_{\max} = r \left(10 - d^2 + 10d^3 - 6d^4 + \frac{3}{4}d^6 \right)^{1/2} / (4 - d^3) - R$$

mit $d = (t - d)/(t + c)$.

Gelöst wird Gleichung (B5) mit einer Verallgemeinerung der Regula Falsi /65/ auf zwei Dimensionen mit beschränkter Schrittweite. Mit den Startwerten $(t_0, c_0) = (r/2, s + R)$ erhält man im gesamten Bereich Konvergenz, in dem (B5) überhaupt lösbar ist. Wenn die Kerne zusammenhängen ($e_i = 0$), führt Gleichung (B5) auf algebraische Gleichungen von höchstens 4. Grad, die sogar analytisch lösbar sind.

Anhang C : Literatur

- /1/G. Gamov Z. Phys. 52(28)510; 51(28)204
- /2/D.L. Hill J.A. Wheeler Phys. Rev. 89(53)1102
- /3/T.M. Cormier Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 32(82)271
- A.B. Balantekin, S.E. Konin, S.E. Negele : Phys. Rev. C 28(83)1565
- /4/L. Vaz, M. Alexander, G.R. Satchler : Phys. Rep. 69, Nr.5(81)373
- /5/M. Beckerman al. Phys. Rep. 129(85)223
- /6/R.G. Stokstad et al. Phys. Rev. Lett. 41, Nr. 7(78)465
- R.G. Stokstad et al. Phys. Rev. C 21(80)2427
- /7/M. Beckerman et al. Phys. Rev. Lett. 45, Nr. 18(80)1472
- /8/M. Beckerman et al. Phys. Rev. C 29(84)1938
- /9/M. Beckerman et al. Phys. Rev. Lett. 50, Nr. 7(83)471
- R. D. Ecker et al. in Proc of 'The many facets of heavy ion fusion reactions', ANL, USA March(86)
- /10/R.G. Stokstad et al. Z. Phys. A 295(80)269
- /11/W. Reisdorf et al. Phys. Rev. Lett. 49, Nr. 25(82)1812
- /12/H. Hofmann Nucl. Phys. A 224(74)116
- /13/P. Ring, M. Massmann, O. J. Rasmussen : Nucl. Phys. A 296(78)50
- /14/T. Kodama et al. Phys. Rev. C 17(78)111
- /15/H. Esbensen Nucl. Phys. A 352(81)147
- /16/H. Esbensen, J.Q. Wu, G.F. Bertsch : Nucl. Phys. A 411(83)275
- /17/H. Esbensen et al. Phys. Rev. Lett. 41, Nr. 5(78)296
- /18/C.H. Dasso, S. Landowne, A. Winther : Nucl. Phys. A 405(83)381
- /19/C.H. Dasso, S. Landowne, A. Winther : Nucl. Phys. A 407(83)221
- /20/S. Landowne in Proc. 'Conf. on Nuclear Structure with Heavy Ions', Legnaro 1985, ed. R.A. Ricci, C. Villi, Ital. Phys. Soc. (86)
- /21/R.A. Broglia et al. Phys. Lett. 133B, Nr. 1,2(83)34
- /22/S. Landowne, C.H. Dasso Phys. Lett. 138B, Nr. 1,2,3(84)32
- /23/G.R. Satchler Direct Nuclear Reactions, Oxford, University Press, New York(83)
- /24/T. Tamura, T. Udagawa, T. Kim : Phys. Rev. C 32(85)124
- T. Udagawa, T. Tamura Phys. Rev. C 29(84)1922
- /25/W. Scobel et al. Phys. Rev. C 11(75)1701
- /26/H.J. Krappe et al. Z. Phys. A 314(83)23
- /27/H.J. Krappe in Proc. 'Symp. on Deep - Inelastic and Fusion Reactions with Heavy Ions', Berlin 72, Lecture

- Notes in Physics 117(80)312
- /28/W. Swiatecki Nucl. Phys. A 376(82)275
- /29/M. Beckerman et al. Phys. Rev. C 23(81)1581
- M. Beckerman et al. Phys. Rev. C 25(82)837
- /30/C.Y. Wong Phys. Rev. Lett. 31, Nr. 12(73)766
- /31/A.M. Borges et al. in 'Fusion Reactions Below the Coulomb Barrier' ed. S.G. Steadman, Lecture Notes in Physics Vol. 219, Springer, Berlin(85)
- B. Haas et al. Phys. Rev. Lett. 54, Nr. 5(85)398
- J.P. Nolan et al. Phys. Rev. Lett. 54, Nr. 20(85)2211
- S. Gil et al. Phys. Rev. C 31(85)1752
- /32/R. Vandenbosch et al. Phys. Rev. Lett. 56, Nr. 12(86)1234
- /33/S. Landowne, J.R. Nix Nucl. Phys. A 368(81)364
- /34/H. Feldmeier in Proc. 'Int. Workshop on Gross Properties of Nuclei and Nuclear Excitations', X, Hirschegg (82)26
- W. Swiatecki Phys. Scripta 24(81)113
- J. Blocki et al. Phys. Lett. 99B, Nr. 1(81)13
- /35/L. Rodberg, S. Thaler Introduction to the Quantum Theory of Scattering, Academic Press(60)
- /36/J. Schneider Diplomarbeit, Uni München (82), unveröffentlicht
- /37/W. Brenig, R. Haag Fortschr. der Physik 7(59)183
- /38/A. Arnoldi Propagation von Wellenpaketen in einem stark lokalisiertem Potential, Dissertation TU München (79)
- /39/A. Goldberg, H.M. Schey, J.L. Schwarz : Amer. J. Phys. 35(67)177
- /40/R.W. Hasse Comp. Phys. Comm. 11(76)353
- /41/K. Hahn Diplomarbeit Uni München' (78), unveröffentlicht
- /42/M. Brack et al. Rev. Mod. Phys. 25(74)69
- /43/T. Ledergerber, H.C. Pauli Nucl. Phys. A 207(73)1
- /44/W.H. Miller Adv. Chem. Phys. 25(74)69
- /45/P. Fröbrich Phys Rep. 116(1986)337
- P. Fröbrich, K. Möhring Verh. DPG(IV)20(1985)404
- /46/G.H. Rawischer Nucl. Phys. 85(66)337
- M.D. Kostin J. Chem. Phys. 57(72)3589
- /47/R.W. Hasse J. Math. Phys. 16, Nr. 10(75)2005
- K. Albrecht Phys. Lett. 56B, Nr. 2(75)127
- /48/N. Frömann, P.O. Frömann JWKB Approximation, North Holland,

- Amsterdam(65)
- /49/M. Abramowitz, I.A. Stegun Handbook of Mathematical Functions, Dover Publ.(68)
- /50/H.J. Krappe, J.R. Nix, A.J. Sierk : Phys. Rev. C 20(79)992
- /51/G.R. Satchler, W.G. Love Phys. Rep. C 55(79)183
G.R. Satchler Nucl. Phys. A 329(79)233
- /52/J. Blocki et al. Ann. Phys. (N.Y.) 105(77)427
- /53/K. Siwek – Wilczynska, J. Wilczynski : Phys. Lett. 74B(78)313
- /54/Bohr, Mottelson Nuclear Structure Vol. II, Benjamin, Reading(75)
- /55/T. Tamura Rev. Mod. Phys. 37, Nr. 1(65)679
- /56/P. M. Jacobs, U. Smilansky Phys. Lett. 127B(83)313
- /57/S. Landowne, S.C. Piper Phys. Rev. C 29(84)1352
- /58/O. Tanimura, J. Makowka, U. Mosel : Phys. Lett. 163B(85)317
- /59/J. Raynal IAEA – SMR – 9/8 p. 281
- /60/W. Schomburg et al. in 'Fusion Reactions Below the Coulomb Barrier' ed. S.G. Steadman, Lecture Notes in Physics Vol. 219, Springer, Berlin(85)
- /61/K. Rottman Mathem. Formelsammlung, BI, Mannheim (60)
- /62/F.L. Bauer, J. Goos Informatik I, Springer (71)
- /63/U. Post, J. Kunz, U. Mosel Preprint
- /64/A. Messiah Quantum Mechanics, North Holland, Amsterdam(70)
- /65/G. Jordan – Engeln, F. Reuter : Formelsammlung zur numerischen Mathematik, BI Nr. 106, Mannheim(81)
- /66/H.J. Krappe Nucl. Phys. A 269(76)493
- /67/H.J. Krappe, J.R. Nix in Proc. '3. IAEA Symp. of the Physics and Chemistry of Fission', Rochester(73), IAEA Wien Vol. I (74)159
- /68/P. Möller, J.R. Nix Nucl. Phys. A 361(81)117
- /69/W.D. Myers Nucl. Phys. A 204(73)465
- /70/H.J. Krappe Private Mitteilung
- /71/K. Möhring Private Mitteilung
- /72/C.Y. Wong Nucl. Data A 4(68)271
- /73/J. Wiggins et al. Phys. Rev. C 31(85)1315
- /74/J.R. Nix Nucl. Phys. A 130(69)241
- /75/K. Möhring et al. in 'Fusion Reactions Below the Coulomb Barrier', ed. S.G. Steadman, Lecture Notes in Physics Vol. 219, Springer, Berlin(85)

- /76/A. Gavron Phys. Rev. C 21(80)230
 /77/C.H. Dasso, H. Esbesen, S. Landowne : Phys. Rev. Lett. 57(86)1498
 /78/H. Esbesen, S. Landowne PHY - 4873 - TH - 86
 /79/M.J. Rhoades - Brown, M. Prakash : Phys. Rev. Lett. 53, Nr. 4(84)333
 /80/C.H. Dasso, J.D. Garret, S. Landowne : Phys. Lett. B 161(85), 36
 /81/G. Hämmerlin Numerische Mathematik I, BI, Mannheim(70)
 L. Collatz Numerische Behandlung von Differentialgleichungen,
 Springer, Berlin(55)
 /82/H.R. Schwarz, H. Rutishauser, E. Stiefel : Numerik symmetrischer Matrizen,
 Teubner, Stuttgart(68)
 /83/A.C. Hearn Reduce User's Manual, RAND Corp., Santa
 Monica(84)

Herrn Prof. Wolter danke ich für die Anregung zu dieser Arbeit, die intensive Betreuung und das angenehme Arbeitsklima.

Allen Mitarbeitern unserer Gruppe und des Lehrstuhls Süßmann, besonders Herrn Dr. Lenske danke ich für viele hilfreiche Diskussionen und Ratschläge.

Herrn Dr. Landowne danke ich für einige nützliche Diskussionen. Eine Arbeit von ihm war Ausgangspunkt für diese Arbeit.

Herrn Prof. Nix und Herrn Prof. Krappe danke ich für Hinweise zur Berechnung der Potentiale, Herrn Dr. Sierk und Herrn Dr. Möhring dafür, daß sie mir Programme zur Verfügung gestellt haben.

Den Mitarbeitern des Leibnitz Rechenzentrums danke ich für die Beratung bei Programmierfragen und dafür, daß sie sich immer bemüht haben, mir über die Schwächen des Computers hinwegzuhelfen.

Nicht zuletzt gilt mein Dank Frau Grund, Herrn Stadler und Frau Mager für ihre Unterstützung bei organisatorischen Problemen.

Lebenslauf

Name	Jürgen Schneider
Geburt	7.9.1956 in München
Familienstand	ledig
Staatsangehörigkeit	deutsch
Eltern	Kurt Schneider, Zollbeamter i.R. Hedy Schneider, Verkäuferin
Bruder	Michael Schneider, geb. 26.1.63, Gastwirt
Wohnort	8011 Baldham, Otterweg 18
Schulbildung	1962 – 66 Volksschulen Freilassing und Unterwössen 1966 – 67 Landschulheim Marquartstein (Gymnasium) 1967 – 75 Klenzgymnasium München 21.6.75 Abitur
Studium	1975 – 82 Studium der Physik an der Ludwig – Maximilians Universität München 18.5.77 Diplomvorprüfung Nebenfach Informatik mit Schwerpunkt Systemprogrammierung Diplomarbeit in theoretischer Kernphysik am Lehrstuhl Süßmann bei Prof. Wolter über 'Wellenpaketbeschreibung inelastischer Kernstöße' 21.4.82 Diplom Hauptprüfung
Promotion	seit 1983, Untersuchung von Fusionsreaktionen schwerer Ionen Abschluß Mai 1987
Anstellung	1.2.1983 – 28.2.87 wissenschaftliche Hilfskraft an der Universität München

